



**HAL**  
open science

# Influence de la microstructure sur le comportement local dans les aciers 16MND5

Seddik Sekfali

► **To cite this version:**

Seddik Sekfali. Influence de la microstructure sur le comportement local dans les aciers 16MND5. Sciences de l'ingénieur [physics]. Ecole Centrale Paris, 2004. Français. NNT : . tel-00419622

**HAL Id: tel-00419622**

**<https://theses.hal.science/tel-00419622>**

Submitted on 24 Sep 2009

**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.



École Centrale Paris  
Laboratoire de Mécanique  
Sols, Structures et Matériaux  
UMR8579

N° d'ordre : 2004 - 12

# Thèse

présentée par

**Seddik SEKFALI**

pour obtenir le grade de

DOCTEUR

de l'École Centrale Des Arts et Manufactures

« École Centrale Paris »

Spécialité : Mécanique et Matériaux

Soutenue le 07/06/2004

## Influence de la microstructure sur le comportement local dans les aciers 16MND5

En Partenariat avec le SRMA/CEA/SACLAY  
Contrat n° : SAV 29140/VCH

devant un jury composé de :	J.H. Schmitt (ECP)	Président
	S. Degallaix (ECL)	Rapporteur
	G. Rousselier (EDF)	Rapporteur
	C. Rey (ECP)	Directrice de thèse
	B. Marini (CEA)	Examineur
	C. Prioul (ECP)	Examineur
	O. Bouaziz (Arcelor)	Examineur

2004

École Centrale Paris  
Grande voie des vignes, 92295 Châtenay Malabry, France

## Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier monsieur *J-H. Schmitt*, d'avoir présider mon jury de thèse et cela malgré un emploi du temps très chargé. Je tiens aussi à exprimer toute ma gratitude à madame *S. Degallaix* et monsieur *G. Rousselier* pour avoir accepté de rapporter sur ce mémoire. Un grand merci évidemment aux autres membres du jury, à messieurs *O. Bouaziz*, *B. Marini* et *C. Prioul* pour avoir lu attentivement le contenu de ce rapport.

Le plus grand mérite revient à madame *C. Rey*, grâce à laquelle j'ai pu réaliser ce travail dans un cadre aussi agréable. Je tiens absolument à lui exprimer toute ma gratitude pour la confiance qu'elle m'a accordée en m'autorisant à intégrer le *DEA Mécanique et Matériaux*, pour tout le temps qu'elle a pu consacrer à ce travail, non seulement, le soir très tard et même les week-ends. Je regretterai sûrement, les longues discussions que nous avons eues sur des sujets concernant ce travail et même en dehors de celui-ci. Je pense à mes premières présentations qui étaient, faut bien le dire, catastrophiques et qui lui avaient donné des sueurs froides mais malgré cela, elle a su m'encourager et me donner tout ce qu'elle pouvait sans aucune retenue. Je tiens aussi à signaler que quoi que je fasse, je ne pourrais jamais assez la remercier pour tout ce qu'elle a fait pour moi.

Je remercie aussi monsieur *B. Marini* qui m'a permis d'effectuer ce travail en partenariat avec le CEA, pour les longues discussions qu'on a pu avoir tout au long de ces trois dernières années. Je suis sincèrement reconnaissant envers madame *C. Berdin-Meric* et monsieur *C. Prioul* pour leurs contributions au bon déroulement de ce travail.

Merci aux techniciens du laboratoire, à Françoise Garnier pour m'avoir initié à la microscopie électronique à balayage, à Sylviane Bourgeois, Sokona Konaté, Eric Perrin, Nicolas Roubier et Philippe Lambert pour leur aide concernant les essais mécaniques et la préparation des échantillons.

Un grand Merci à Nadège Ols et Daniel Kervern pour leur bonne humeur même dans les moments difficiles. Bien entendu à ceux avec qui j'ai partagé un agréable moment de ma vie pendant ces trois dernières années, Serge, Philippe, Olivier, Antoine, Ann-Lenaig, Jérôme, Maximilien, Méjido, Christine, Laurent, Cécile, Amandine, Batiste, Arsène, Benoît, Amjad et Cédric. Je regretterais les longues discussions qu'on a eues au RU de la Croix de Berny.

Bien sûr, c'est à mes parents qui m'ont toujours soutenu et encouragé dans mes différents choix d'études et personnels que je dédie ce travail. Enfin à tous mes amis et à tous ceux qui ont participé de près ou de loin à l'aboutissement de ce travail.



## Résumé

L'acier 16MND5 ou A508 Cl3 est utilisé pour la fabrication par forgeage des cuves de réacteurs nucléaires à eau sous pression.

Ce matériau présente un bon compromis en terme de ténacité et de limite d'élasticité, sa microstructure est principalement bainitique revenue. Du fait de la variation locale de la composition chimique et du procédé d'élaboration, ce matériau présente des hétérogénéités microstructurales qui peuvent modifier localement les propriétés du point de vue de l'endommagement. En particulier, certaines zones présentent une microstructure martensitique dont les propriétés à la rupture sont différentes de celles de la bainite.

Le but de cette thèse est d'apporter quelques éclaircissements sur l'influence de la microstructure ; plus particulièrement, la taille des entités cristallographiques et leur distribution spatiale sur le comportement local de l'acier 16MND5.

Deux microstructures ont été élaborées à cet effet ; une microstructure bainitique revenue et une microstructure martensitique revenue. Une caractérisation expérimentale a été réalisée sur les deux microstructures afin de déterminer la morphologie, la distribution spatiale des orientations cristallographiques et le comportement en traction.

Un dépôt de grille a été effectué sur des éprouvettes de traction plates pour permettre de déterminer le champ déformation expérimental sur une zone préalablement analysée en EBSD.

La détermination du comportement en traction a permis l'identification à l'aide d'une méthode inverse d'une loi de comportement multicristalline faisant intervenir la densité de dislocation sur chaque système de glissement. Cette loi de comportement a été utilisée dans des simulations à l'aide de la méthode des éléments finis pour simuler le comportement des deux microstructures en traction et comparer aux champs de déformations expérimentaux de celles-ci. Il en résulte une bonne adéquation entre les simulations et les expériences et la mise en évidence de l'influence de l'orientation des grains voisins sur le comportement local.

## Abstract

16MND5 Steel or A508 Cl3 is used for manufacture by forging of nuclear reactor vessels. This material presents a good compromise in term of tenacity and yield stress, its microstructure is mainly bainitic tempered. Because of the chemical composition local variation and process of development, this material presents microstructural heterogeneities which can locally modify the properties of damage. In particular, some zones present a martensitic microstructure.

The goal of this thesis is to bring some explanations on the influence of the microstructure; more particularly, size of the crystallographic entities and their spatial distribution on the local behaviour of 16MND5 steel. Two microstructures were elaborated for this purpose, a tempered bainitic microstructure and a tempered martensitic microstructure. An experimental characterization was carried out on the two microstructures in order to determine morphology, spatial distribution of the crystallographic orientations and tensile behaviour. A deposit of microgrid was carried out on tensile specimens to determine the experimental deformation field on a beforehand EBSD analyzed zone.

The determination of the tensile behaviour allowed the identification of a multicristalline behaviour law by a reverse method using the density of dislocation on each system of slip. This behaviour law was used in simulations with a finite element method to simulate the local mechanical field of the two microstructures and to compare with the obtained experimental deformation fields. It results, a good adequacy between simulations and experiments and the description of the influence of the neighbor grain's orientation on the local behaviour.



# ***SOMMAIRE***

POSITION DU PROBLEME.....	5
---------------------------	---

## **CHAPITRE I : BIBLIOGRAPHIE**

1 GENERALITE SUR LA TRANSFORMATION DES ACIERS.....	7
1-1 Les transformations displacives.....	8
1-2 Les variants et les plans d'habitat.....	11
1-3 Diffusion du carbone et mécanismes de nucléation et de croissance.....	12
1-4 La martensite.....	13
1-5 La bainite.....	14
1-5-1 Bainite supérieure.....	15
1-5-2 Bainite inférieure.....	17
1-5-3 La transition bainite supérieure/bainites inférieure.....	18
1-5-4 La bainite granulaire.....	18
1-6 Traitement de revenu de la bainite et de la martensite.....	19
2 MECANISMES ELEMENTAIRES DE LA DEFORMATION PLASTIQUE DES MONOCRISTAUX CC .....	20
2-1 Elasticité des monocristaux à structure cubique centrée.....	20
2-1-1 Anisotropie de l'élasticité des monocristaux de structure cubique centrée.....	21
2-2 Mécanismes élémentaires de déformation des cristaux de structure cubique centrée.....	21
2-2-1 Systèmes de glissement.....	22
2-2-2 Les mécanismes élémentaires.....	22
2-2-2-1 Déformation par doubles décrochements.....	23
2-2-2-2 Interactions des dislocations mobiles avec les arbres de la forêt.....	23
2-2-2-3 La tension de ligne.....	23
2-2-2-4 La dissociation du coeur des dislocations.....	23
2-2-2-5 Asymétrie du glissement de type $\{112\}$ .....	24
2-2-2-6 Critère de Schmid.....	24
2-2-2-7 Rotation du réseau cristallin.....	26
2-2-3 Influence des impuretés sur le comportement des métaux CC.....	27
3 MODELISATION DU COMPORTEMENT DES MONOCRISTAUX ET POLYCRISTAUX CC.....	27
3-1 Loi d'écoulement.....	27
3-1-1 Ecoulement plastique.....	27
3-1-2 Ecoulement viscoplastique.....	28
3-2 Lois d'écrouissage.....	29

3-2-1	Modèles d'écrouissage phénoménologiques en microplasticité.....	31
3-2-2	Modèles d'écrouissage en plasticité cristalline intégrant la densité de glissement comme variable interne.....	32
3-3	Introduction d'effets d'échelle dans les mécanismes d'écrouissage.....	36
3-4	Modélisation du comportement du polycristal par transition d'échelles.....	40
3-4-1	Définition des échelles de travail.....	40
3-4-2	Différents modèles de changement d'échelle.....	41
3-4-2-1	Modèle de Taylor et dérivés.....	41
3-4-2-2	Modèles autocohérents.....	42

## **CHAPITRE II : ELABORATION ET CARACTERISATION DES MATERIAUX**

1	MATERIAUX D'ORIGINE ET ELABORATION DES MATERIAUX.....	45
2	MICROSTRUCTURES DES MATERIAUX ELABORES.....	47
2-1	Structure bainitique revenue.....	47
2-2	Structure martensitique revenue.....	51
3	MICROSTRUCTURES DE DISLOCATIONS .....	54
3-1	Bainite.....	54
3-2	Martensite.....	55
4	COMPORTEMENT MECANIQUE DES MATERIAUX.....	56

## **CHAPITRE III : ANALYSES EXPERIMENTALES ET NUMERIQUES**

1	INTRODUCTION.....	59
2	SIMULATION NUMERIQUE.....	60
2-1	Le modèle cristallin .....	60
2-2	Identification des lois de comportement.....	62
2-3	Maillages - Conditions aux limites- Représentation des joints de grains.....	64
2-3-1	Maillage de la structure.....	64
2-3-2	Représentation des joints de grains.....	65
2-3-3	Conditions aux limites.....	66
3	ETUDE EXPERIMENTALE ET NUMERIQUE DE LA BAINITE REVENUE .....	66
3-1	Etude expérimentale de la bainite revenue.....	66
3-2	Simulation numérique de la bainite revenue.....	72
4	ANALYSE EXPERIMENTALE ET NUMERIQUE DE LA MARTENSITE REVENUE .....	78
4-1	Etude expérimentale de la martensite revenue.....	78
4-2	Simulation numérique de la martensite revenue.....	80
5	DISCUSSION DES RESULTATS.....	82

## **CHAPITRE IV : ETUDE PARAMETRIQUE**

1	ETUDE DU COMPORTEMENT MONCRISTALLIN.....	85
1-1	Monocristaux de ferrite.....	85
1-2	Comportement de ‘monocristaux’ de bainite et de martensite.....	87
2	ETUDE DES CONDITIONS AUX LIMITES. INFLUENCE D’UNE COUCHE DE MILIEU HOMOGENE EQUIVALENT.....	90
2-1	Bainite.....	90
2-1-1	Résultats des simulations.....	91
2-1-2	Analyse des résultats.....	93
2-2	MARTENSITE.....	94
2-2-1	Caractérisation de l’agrégat.....	94
2-2-2	Résultats des simulations.....	96
3	ROLE DE LA MICROSTRUCTURE.....	100
3-1	Morphologie identique - orientation des lattes aléatoires.....	100
3-2	Morphologie modifiée et orientations inchangées.....	101

## **CHAPITRE V : PRISE EN COMPTE D’UNE COUCHE DE GRAINS SOUS LA FORME D’UN MILIEU HOMOGENE EQUIVALENT**

1	SIMULATION DE LA BAINITE.....	103
2	SIMULATION DE LA MARTENSITE.....	106
3	SYNTHESE DES RESULTATS – DISCUSSION.....	111
3-1	Représentativité des agrégats avec et sans MHE.....	111
4	CHAMPS MÉCANIQUES LOCAUX ET ENDOMMAGEMENT.....	114
4-1	Contraintes normales aux joints.....	116
4-1-1	Représentation des joints.....	116
4-1-2	Observations au MEB des plaquettes de cémentite d’une bainite déformée de 5%.....	120
5	DISCUSSION SUR LA RUPTURE INTERGRANULAIRE.....	121

## **CHAPITRE VI :CONCLUSION.....**

	BIBLIOGRAPHIE.....	127
	ANNEXE I.....	141
	ANNEXE II.....	143
	ANNEXE III.....	145
	ANNEXE IV.....	153
	ANNEXE V-1.....	155

ANNEXE V-2.....	158
ANNEXE V-3.....	160
ANNEXE V-4.....	162
ANNEXE VI.....	163
ANNEXE VII.....	165

## POSITION DU PROBLEME

La cuve des Réacteurs à Eau sous Pression est un élément de la seconde barrière de sûreté. Elle est constituée de plusieurs éléments forgés et assemblés par soudage. Le diamètre d'une cuve de réacteur de 900 MW est de 4 m, sa hauteur de 13 m environ et sa masse totale de 330 tonnes. Ces caractéristiques augmentent sensiblement pour les réacteurs de type N4 d'une puissance électrique de 1450 MW, le diamètre passant à 4,5 m environ, la hauteur à 13,6 m pour une masse totale de 453 tonnes. L'épaisseur des viroles au niveau du cœur est de 200 mm pour les REP 900 et de 225 mm pour le N4. Ces dimensions résultent essentiellement de la pression de 15 MPa environ de l'eau primaire et des caractéristiques mécaniques de l'acier de cuve en 16MND5 à la température de fonctionnement (280°C). La composition chimique de l'acier de cuve 16MND5 vise à assurer une structure majoritairement bainitique par trempe à l'eau dans toute l'épaisseur du composant, la microstructure bainitique étant un bon compromis entre la résistance mécanique et la ténacité. L'irradiation neutronique durcit l'acier de cuve et accroît la température de transition fragile-ductile. Cette évolution, principalement fonction de la composition chimique de l'acier, détermine la durée de vie de la cuve et en conséquence celle du réacteur.

Lors de la trempe des différents constituants de la cuve, la peau externe du matériau est refroidie, depuis le domaine austénitique, plus rapidement que le cœur. De cette différence de vitesse de trempe, résultent des microstructures différentes allant de la bainite supérieure pour les vitesses les plus élevées à un mélange ferrite-bainite inférieure pour les vitesses les plus faibles. Cette variété des microstructures est accentuée par les ségrégations majeures et mineures en éléments d'alliage et impuretés héritées de la solidification en lingot, certaines micro-ségrégations conduisant vraisemblablement à l'apparition de petites zones à microstructure martensitique.

Afin de protéger l'acier de cuve de la corrosion par l'eau primaire, l'intérieur de la cuve est revêtu d'acier inoxydable austénitique. Ce dépôt est réalisé par la technique « feuillard-flux » qui conduit à la création d'une Zone Thermiquement Affectée (ZAT) sur toute la surface intérieure de la cuve. La présence de cette ZAT a pour conséquence de modifier les microstructures sous-jacentes, introduisant des zones à « gros grains », des zones « inter-critiques » ainsi que des zones à « grains fins ». La disparité de propriétés de toutes ces microstructures est fortement réduite par revenu lors des traitements thermiques. Il n'en reste pas moins que les propriétés mécaniques et susceptibilités au vieillissement thermique et à l'irradiation neutronique sont a priori différentes et méritent une attention particulière.

Il a été montré que les microstructures bainitique et martensitique ne présentent pas la même sensibilité à la rupture intergranulaire induite par la ségrégation du phosphore [RAO99]. Les mécanismes conduisant à ce constat ne sont pas clairement identifiés. On peut penser que les différences de microstructures comme la nature, les dimensions et la répartition des carbures ainsi que la quantité des interfaces pouvant piéger le phosphore, jouent un rôle important. Toutefois, puisqu'il s'agit de comportement à rupture, les différences de mécanismes de déformation et d'endommagement entre la bainite et la martensite peuvent constituer une part de l'explication de la différence de sensibilité à la rupture intergranulaire par ségrégation du phosphore de ces deux micro-structures.

Le premier objectif de ce travail est de mettre en place une méthodologie à l'échelle de l'agrégat polycristallin qui permette l'étude comparative, entre bainite et martensite, des champs mécaniques et de leur hétérogénéité. L'objectif final est d'en déduire les conséquences sur les modes d'endommagement et de rupture des deux micro-structures.

Pour atteindre le premier objectif, deux microstructures ont été élaborées par traitement thermique à partir de l'acier 16MND5 fourni par le CEA. La bainite supérieure et la martensite, obtenues après traitements thermiques, contiennent de fortes contraintes internes induites par les transformations displacives qui permettent de passer de l'austénite, de structure cubique face centrée, aux deux microstructures de structure cubique centrée. Un revenu a donc été effectué afin de diminuer ces contraintes.

Les deux microstructures se différencient par leur morphologie, la distribution des orientations des «grains» qui sont des lattes ou des paquets de lattes, la répartition du carbone.

Pour modéliser le comportement local de ces deux matériaux, nous avons utilisé un modèle cristallin développé à l'ECP, utilisant la méthode des éléments finis du code ABAQUS.

Les agrégats simulés sont discrétisés, sur la base de mesures expérimentales par «Orientation Imaging by Microscopy». Cette méthode connue sous le nom EBSD permet de connaître à l'échelle de  $0.5\mu\text{m}$ , les orientations, la forme des lattes et leur position dans l'agrégat. Si le modèle prend en compte les interactions entre grains réels, en revanche, il ne prend pas en compte les mécanismes de déformation spécifiques à la répartition du carbone. Le rôle du carbone n'intervient donc qu'à travers les paramètres matériaux du modèle, identifiés par une méthode inverse, à partir d'essais de traction simple et de la texture cristalline.

L'approche cristalline fournit les champs de contraintes, de déformations et d'orientations en fonction du chargement imposé. Les résultats de la simulation ont été comparés, lorsque cela a été possible, aux champs de déformations obtenus par micro-extensométrie sur des échantillons à l'origine des agrégats simulés, déformés en traction simple dans un Microscope Electronique à Balayage.

Le mémoire contient cinq chapitres :

Le chapitre I comprend une bibliographie sur les matériaux étudiés et sur les approches cristallines.

Le chapitre II est une présentation des matériaux.

Le chapitre III concerne les résultats des modélisations d'une couche de grains de bainite et de martensite revenues et la comparaison avec les expériences.

Le chapitre IV est une analyse critique des résultats conduisant à une étude paramétrique.

Le chapitre V reprend les modélisations en considérant l'effet d'une deuxième couche de grains représentée par un milieu homogène équivalent. Une réflexion sur l'endommagement de ces deux microstructures clôt ce chapitre.

Le dernier chapitre correspond à la conclusion et aux perspectives.

# CHAPITRE I

## BIBLIOGRAPHIE

### LES ACIERS BAINITIQUES ET MARTENSITIQUES

#### MECANISMES ELEMENTAIRES DE LA PLASTICITE DANS LE FER PUR MODELISATION DES POLYCRISTAUX DE STRUCTURE CUBIQUE CENTREE

L'objectif de ce travail est d'étudier l'influence de la texture morphologique et de la texture locale sur le comportement plastique afin, à plus long terme, de comprendre, du point de vue de la mécanique, les différences de comportement à la rupture de la bainite et de la martensite. Les effets liés à la métallurgie (précipitation d'éléments aux joints de grains, phénomènes de ségrégation...), ayant déjà fait l'objet de nombreux travaux, ne sont pas abordés ici.

Nous rappelons dans ce chapitre :

Les différences entre bainite et martensite.

Les mécanismes élémentaires de la plasticité cristalline des métaux de structure cubique centrée.

Les différentes modélisations du comportement plastique des monocristaux et polycristaux.

### 1 Généralités sur la transformation des aciers

Les structures bainitique et martensitique s'obtiennent par trempe de la phase austénitique (figure I-1). Le rôle de la vitesse de trempe est de modifier la diffusion du carbone et donc la microstructure. La structure bainitique s'obtient pour des vitesses de trempe faibles, inférieures à 5°C/s, et la structure martensite pour des vitesses de trempe supérieures à 20°C/s. L'austénitisation est effectuée à des températures de l'ordre de 1100°C à 1200°C, avec des temps de maintien de l'ordre de 1 heure.

Rappelons que :

L'austénite (cristal parent) est de structure cubique faces centrées.

La martensite et la bainite sont de structure cubique centrée.

Les ferrites basse et haute températures, sont de structure cubique centrée.

La cémentite Fe<sub>3</sub>C est orthorhombique.

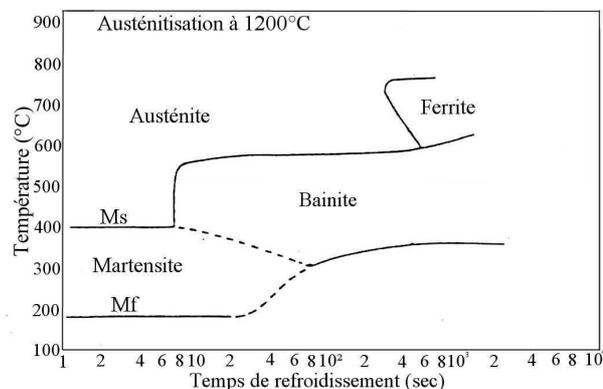


Figure I-1 : Diagramme TTT d'un acier Cu-Ni-Cr-Mo-V.

La bainite isotherme se présente sous forme de paquets de lattes de ferrite séparées par des phases résiduelles constituées principalement par de la cémentite. La bainite existe sous trois formes:

La bainite supérieure, formée de paquets de lattes (30 $\mu$ m à 50 $\mu$ m), composés de sous paquets de lattes fortement désorientés. Les sous paquets comprennent 5 à 10 lattes faiblement désorientées. La précipitation des carbures se fait sous forme de cémentite localisée aux joints de grains austénitiques et entre les lattes de ferrite.

La bainite inférieure se différencie de la bainite supérieure par des carbures de cémentite et de carbures  $\epsilon$ , disposés à la fois entre les lattes et dans les lattes.

La bainite granulaire est composée d'une matrice ferritique et d'îlots de martensite/austénite. Cette structure est obtenue aux très faibles vitesses de refroidissement.

La martensite est constituée de lattes fines présentant de fortes désorientations. Le carbone se trouve en sursaturation dans le réseau cristallin et sous forme de très fins précipités dans les lattes.

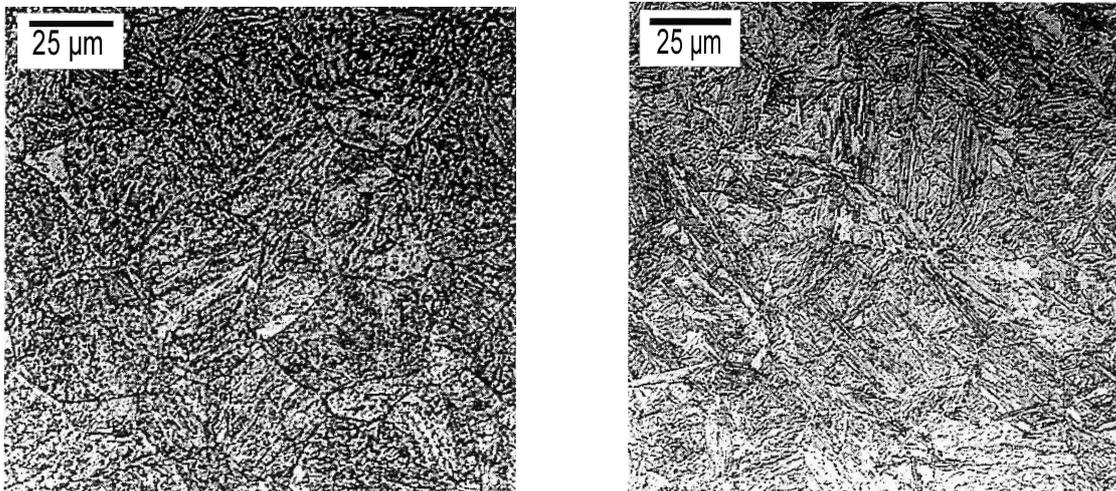


Figure I-2 : *Microstructures de la bainite et de la martensite (CEA).*

### 1-1 Les transformations displacives

La transformation de l'austénite en martensite ou en bainite est de nature displacive, en opposition avec les transformations reconstructives. Dans une telle transformation, l'arrangement atomique du cristal parent, peut être altéré pour donner le produit final, soit:

- par rupture des liaisons atomiques et réarrangement des atomes. Cette transformation reconstructive n'intervient que si la diffusion est possible, c'est à dire si la température et le temps de la transformation le permettent.
- par déformation homogène de la maille initiale, ce qui correspond à une transformation displacive.

Le schéma ci-dessous illustre les deux transformations:

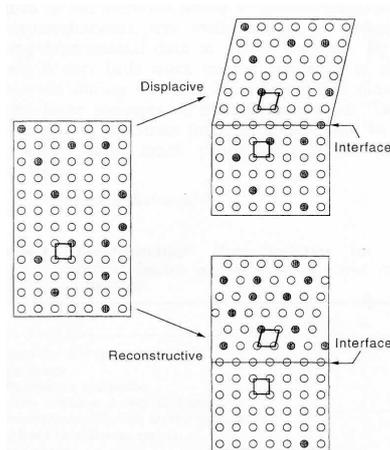


Figure I-3. Transformations displacive et reconstructive

Ces transformations, auxquelles s'ajoutent les mécanismes de diffusion du carbone, gouvernent les microstructures et les propriétés mécaniques des aciers.

Les matériaux utilisés dans ce mémoire, provenant d'une transformation displacive, seule cette transformation est étudiée. Si la transformation displacive est identique pour les deux microstructures, ce n'est pas le cas de la diffusion du carbone qui dépend de la vitesse de refroidissement.

La transformation displacive altère la forme du cristal parent. Le changement de forme induit donc dans la matrice, des contraintes internes élevées qui se relaxent par déformations élastique et plastique de celle-ci. Afin de minimiser les contraintes, la croissance se fait sous forme de fines plaquettes ou lattes. Certains éléments peuvent être piégés lors de la transformation. Le piégeage d'atomes et les déformations induites sont peu favorables du point de vue de la thermodynamique. La transformation displacive, contrairement à la transformation reconstructive, peut être retardée, voire stabilisée par les débris de dislocations qui rendent difficile le déplacement des interfaces glissiles.

Plusieurs théories phénoménologiques ont été proposées pour décrire le passage de l'austénite à la martensite. La transformation de Bain qui fait passer de la phase mère (notée  $\gamma$ ) à la phase martensitique (notée  $\alpha'$ ) est illustrée sur la figure 4. Il est clair que la transformation qui conserve les droites est une transformation affine. D'un point de vue physique, le réseau parent a subi une déformation homogène.

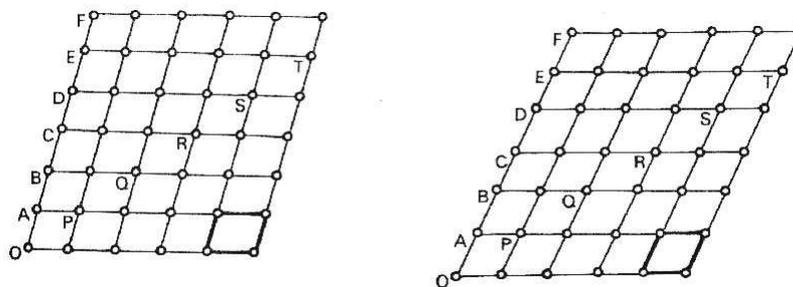


Figure I-4 : Cisaillement du cristal parent pour obtenir la martensite.

La figure I-5, illustre la transformation qui permet d'extraire la cellule de martensite (CC) de l'austénite (CFC). Pour obtenir les dimensions de la maille, Bain fait subir au produit intermédiaire, une compression de 20% le long de l'axe  $[100]_{\gamma}$  et une expansion de 12% dans les deux autres directions.

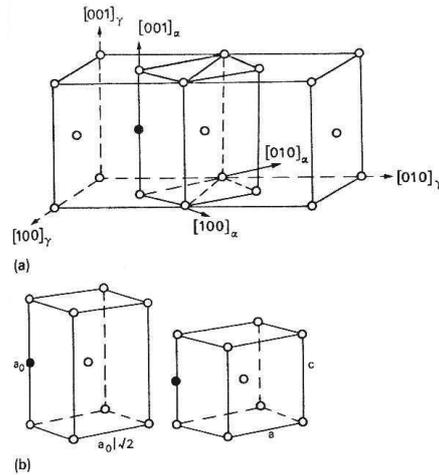


Figure I-5 : Schématisation de la transformation  $\gamma \rightarrow \alpha$  [CHR70]

Cette transformation ne donnant ni les plans et ni les directions invariants, Bhadeshia propose de multiplier la transformation de Bain B, par une rotation de corps rigide R, qui ne change pas les propriétés de la structure. La transformation s'écrit  $R.B=P_2P_1$  où  $P_1$  et  $P_2$  correspondent à deux cisaillements. La première transformation donne la bonne forme à l'élément transformé mais la structure est incorrecte, la seconde donne une forme incorrecte mais la bonne structure. Pour obtenir la forme correcte de l'élément de martensite, deux mécanismes de plasticité peuvent intervenir, le glissement plastique ou le maillage (figure I-6).

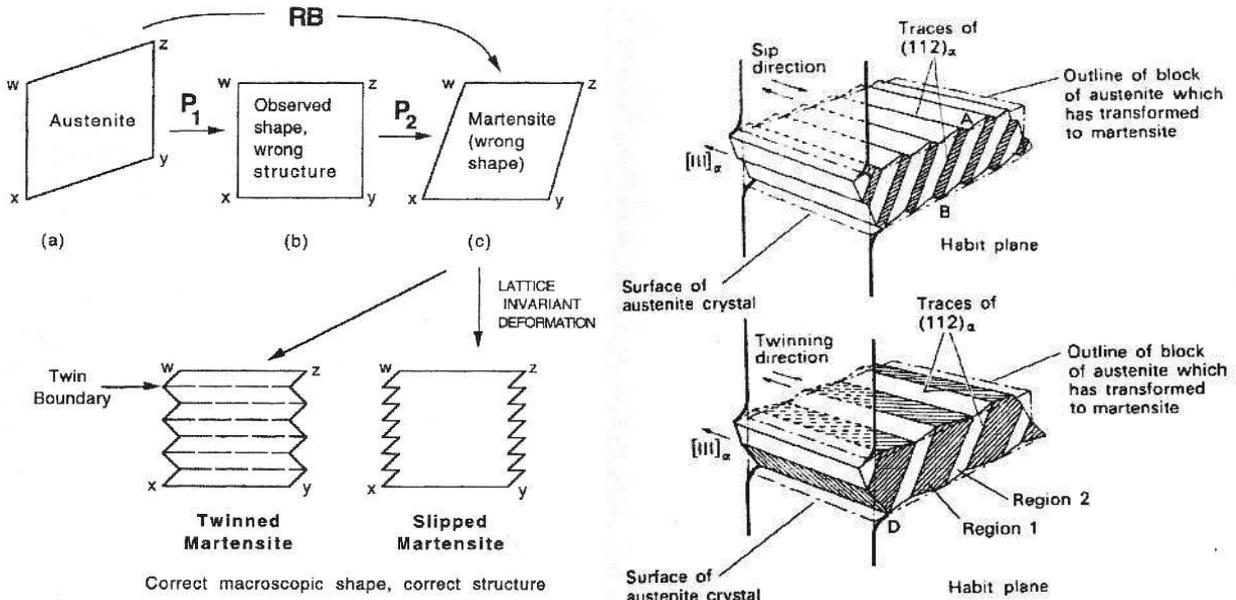


Figure I-6 : (a) Transformations displacives dans la martensite selon Bhadeshia.

(b) Martensite transformée par glissement plastique et clivage.

Le mécanisme de transformation de la bainite est similaire à celui de la martensite à l'exception du maillage.

## 1-2 Les variants et les plans d'habitat

Les relations cristallographiques entre l'austénite et la martensite (bainite) sont bien définies, il s'agit des relations de :

KURDJUMOV ET SACHS (KS) :  $(011)_{\alpha'} // (111)_{\gamma}$  et  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]_{\alpha'} // [\bar{1}\bar{1}0]_{\gamma}$

et NISHIYAMA ET WASSERMAN (NW) :  $(011)_{\alpha'} // (111)_{\gamma}$  et  $[100]_{\alpha'} // [10\bar{1}]_{\gamma}$

Ces deux types de relations diffèrent seulement d'un angle de  $5,26^\circ$  par rapport à l'axe  $[110]_{\alpha'}$  (figure I-7). La relation KS signifie qu'un des 4 plans denses de l'austénite, coïncide avec l'un des 6 plans denses de la ferrite et qu'une des 3 directions denses de l'austénite reste parallèle à une des 2 directions denses de la ferrite. La relation NW conserve seulement le parallélisme des plans denses.

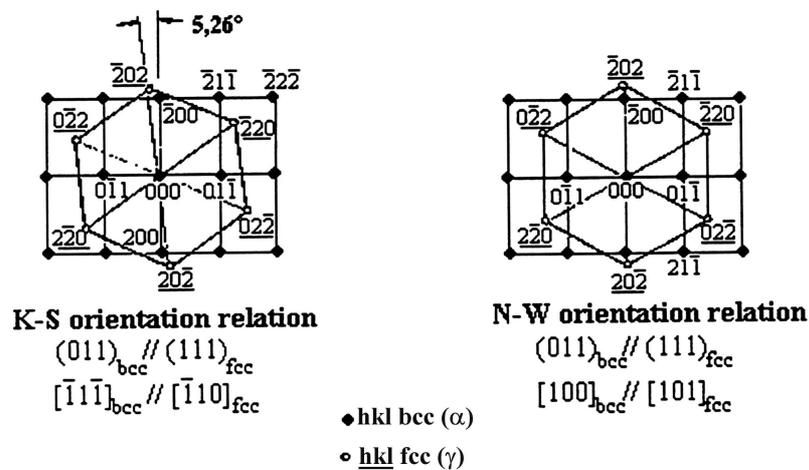


Figure I-7 : Relations d'orientation. [DAN00]

Ces deux relations d'orientation sont observées dans les aciers peu alliés et plutôt à bas carbone.

Les plans d'habitat qui correspondent aux plans des lattes, dépendent du taux de carbone. Pour des concentrations comprises entre 0,5 et 1,4%, les plans d'habitats correspondent aux plans  $(225)_{\gamma}$ , approximativement parallèles à  $(112)_{\alpha'}$ . Pour une concentration de carbone supérieure à 1,4%, le plan d'habitat est proche du plan  $(259)_{\gamma}$ , c'est à dire proche de  $(111)_{\alpha'}$ .

Les figures I-8 et I-9 illustrent la position du plan d'habitat pour différents aciers.

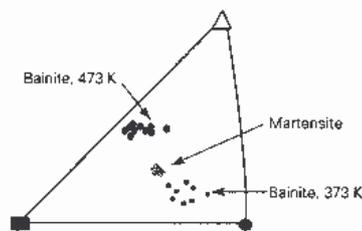


Figure I-8 : Plans d'habitat des lattes de bainite et de la martensite.

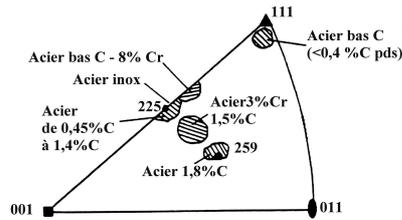


Figure I-9 : Plans d'habitat de la martensite pour différents types d'acier.[PE92]

Dans les deux cas, les interfaces entre l'austénite et la bainite sont cohérentes ou semi-cohérentes. Il faut noter que les ex-joints de grain  $\gamma$ - $\gamma$  de l'austénite correspondent à des régions de fort désordre atomique et sont des zones privilégiées pour la ségrégation d'éléments comme le phosphore.

### 1-3 Diffusion du carbone et mécanismes de nucléation et de croissance

Les mécanismes de diffusion du carbone sont différents dans la bainite et la martensite. Le schéma 8 illustre la formation des bainites supérieure et inférieure.

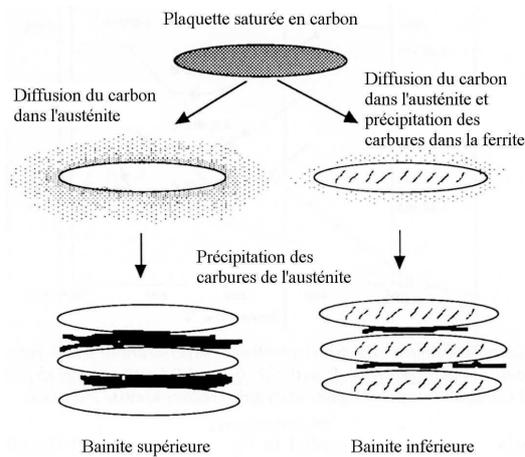


Figure I-10 : Les différentes étapes de la formation de la bainite supérieure et inférieure.

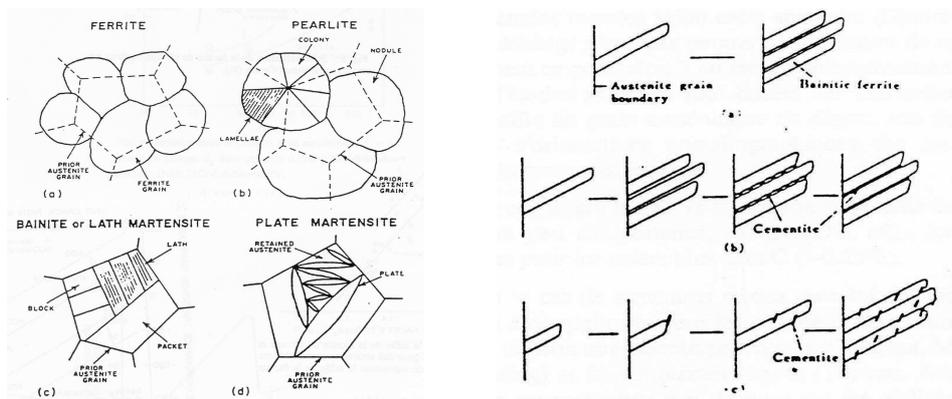


Figure I-11 : (a) Morphologie la bainite et de la martensite (c) et (d)  
(b) Croissance de la bainite

L'existence de cémentite grossière dans la bainite est liée aux mécanismes de transformation. En effet, la bainite supérieure s'obtient dans le domaine des hautes températures et des fortes vitesses de refroidissement. L'austénite se transforme alors en ferrite bainitique, sursaturée en carbone. L'excès de carbone diffuse vers l'austénite non transformée et précipite sous forme de cémentite entre les lattes de ferrite. Dans la bainite inférieure, obtenue à plus basse température, la partition du carbone entre austénite et ferrite est plus lente et celui-ci peut précipiter sous forme de fins carbures dans les lattes de ferrite (figure I-10(b)). Dans la martensite, le carbone est en sursaturation et donne des carbures repartis dans les lattes.

#### 1-4 La martensite

Si le refroidissement par trempe des aciers est suffisamment rapide en partant de l'état austénitique, la décomposition de la phase mère ne peut pas se faire par diffusion et l'on obtient de la martensite.

La transformation martensitique résulte d'un double processus : apparition d'un germe, puis propagation de celui-ci dans la matrice. Elle nécessite le franchissement d'une barrière énergétique (énergie d'activation) gouvernée par une énergie interfaciale  $\gamma/\alpha$  et par une énergie de déformation. Cette dernière ne s'effectue qu'à partir d'une température  $Ar_3$  et s'accroît avec le différentiel de température (refroidissement). Elle est à l'origine de la force motrice de la transformation qui s'amorce pour un différentiel de température suffisant (voisin de  $300^\circ\text{C}$  pour les aciers au carbone et à l'azote). La température de début de transformation est notée  $M_s \approx Ar_3 - 300^\circ\text{C}$ , elle dépend du taux de carbone et de la vitesse de refroidissement sauf pour une transformation martensitique totale où la vitesse de trempe influe peu. Par exemple, dans les aciers bas carbone,  $M_s \approx 500^\circ\text{C}$  (légèrement dépendant des éléments d'addition) pour les grandes vitesses ( $> 3000^\circ\text{C/s}$  pour être 100% martensitique). A plus faible vitesse de trempe, la martensite est remplacée par d'autres constituants (ferrite aciculaire, ferrite polygonale, bainite).

Généralement, il existe plusieurs possibilités d'orientation de la martensite, appelées « variants ». Elles sont caractérisées par des plans d'habitats distincts et des cisaillements d'orientations différentes, mais de même type. Par exemple, dans un monocristal de fer austénitique, il existe 24 variants possibles. Initialement équiprobables, ils se forment de façon à accommoder leurs déformations respectives. Ce nombre conséquent de variants permet une transformation sans déformation macroscopique.

Lors du passage de la structure  $\gamma$  à la martensite  $\alpha'$ , la transformation de *BAIN* fait en sorte que n'importe quel atome de carbone provoque toujours la même tétragonalité de la martensite, c'est à dire une orientation parallèle à  $[001]_{\alpha'}$  et proche de  $[001]_{\gamma}$ . La présence du carbone produit alors un allongement du paramètre  $c_{\alpha'}$ , relativement au paramètre  $a_{\alpha'}$  de la ferrite. Les paramètres cristallographiques de la martensite sont fonction du taux de carbone et sont donnés par la relation établie par *Kurdjumov*, à savoir :

$$c_{\alpha'} = a_{\alpha'} + 0.116 \text{ C\% pds}$$

$$a_{\alpha'} = a_{\alpha} - 0.013 \text{ C\%} \quad \text{où } a_{\alpha} \text{ est le paramètre de maille de la ferrite} = 0.2866 \text{ nm}$$

Nous avons vu que pour obtenir ces conditions d'orientation de plans invariants, il faut, deux cisaillements. Pour la martensite, il en existe deux types permettant de minimiser l'énergie de déformation du cristal :

- Ø Le glissement qui conduit à une martensite avec une forte densité de dislocations (de l'ordre de  $10^{12}/\text{cm}^2$ ). C'est la martensite dite en lattes.

Ø Le maclage qui conduit à une martensite maclée ou micromaclée

La vitesse à laquelle se produit la transformation martensitique impose une interface  $\gamma-\alpha'$  de type semi-cohérent, et donc la création de dislocations de transformation dont le vecteur de BURGERS est commun aux deux phases ou bien la création de macles. Le choix d'un mécanisme plutôt que l'autre dépend de la difficulté de créer les dislocations nécessaires au glissement donc de la limite d'élasticité de l'austénite et indirectement de la composition. En effet, la présence du carbone augmente fortement la limite d'élasticité, diminue la température  $M_p$  et réduit ainsi les possibilités de glissement des dislocations. L'apparition de la martensite en lattes ou maclée est donc en grande partie contrôlée par la proportion de carbone dans l'acier et/ou en solution dans l'austénite, avant la trempe [BHA92] et donc par les conditions d'austénitisation. Plus la quantité de carbone en solution est élevée, plus forte est la proportion de martensite maclée.

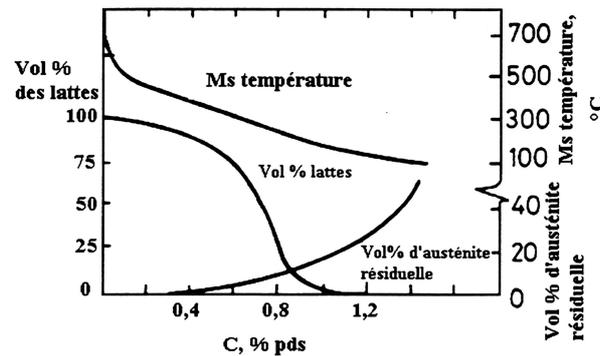


Figure I-12 : Pourcentage estimé d'austénite résiduelle et de martensite en lattes en fonction de la teneur en carbone [BHA92].

Les études relatives à la relation entre la morphologie de la martensite et les propriétés mécaniques, montrent qu'avec une même limite d'élasticité, la ténacité de la martensite maclée est moins bonne que celle de la martensite en lattes [ME73].

Une autre caractéristique de la transformation martensitique provient des fortes contraintes engendrées par la variation de volume et surtout par le cisaillement à l'interface martensite-austénite. Celui-ci peut être critique au point de créer, à la trempe, des microfissures au sein du matériau. Pour éviter ces conséquences, il faut jouer sur les conditions de refroidissement.

*En résumé, les conditions d'austénitisation et de trempe permettent de modifier les caractéristiques morphologiques et topologiques de la martensite. Ces analyses ne tiennent pas compte de la présence d'austénite résiduelle. Or, et c'est un point bien connu, après une trempe, il subsiste toujours une fraction plus ou moins importante d'austénite non transformée, dite austénite résiduelle. De nombreux auteurs estiment que celle-ci joue également un rôle important sur les propriétés mécaniques.*

## 1-5 La Bainite

La courbe TTT de la plupart des aciers présente une large gamme de températures intermédiaires dans laquelle ne se forment ni perlite ni martensite (figure I-1). A la place se forment de fins agrégats de plaquettes (ou lattes) de ferrite et de particules de cémentite appelés bainite. De la bainite peut également être obtenue lors de refroidissements trop rapides pour permettre la formation de perlite, mais pas assez pour permettre celle de

martensite. La nature de la bainite change avec la température de transformation. Trois formes peuvent être distinguées, la bainite supérieure, la bainite inférieure et la bainite granulaire.

### 1-5-1 Bainite supérieure

La bainite supérieure est une microstructure constituée de fines plaquettes de ferrite appelées lattes de  $0.2 \mu\text{m}$  d'épaisseur et  $10 \mu\text{m}$  de long. Les lattes sont parallèles et de même orientation cristallographique, chacune ayant un plan d'habitat bien défini. Elles sont souvent séparées par des joints de grain de faible désorientation ou par des particules de cémentite comme le montre la figure I-13 présentant les caractéristiques à différentes échelles.

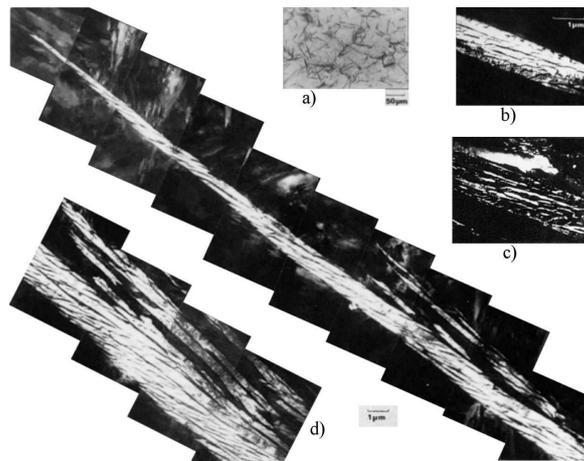


Figure I-13 : *Microstructure de la bainite supérieure* [BE80].

(a) *Microscope optique;*

(b) *Microscope électronique à transmission, champ clair;*

(c) *austénite résiduelle, champ sombre;*

(d) *montage de photos MET d'une latte de bainite (au microscope optique, cette latte apparaît comme une plaquette sombre).*

La bainite supérieure se forme par la nucléation de plaquettes de ferrite aux joints de grain de l'austénite puis par leur croissance. Celle-ci s'accompagne d'une déformation de la région transformée identique à celle de la martensite. Cependant, la croissance de la bainite se fait à des températures relativement hautes par rapport au domaine de la transformation martensitique.

La limite d'élasticité de l'austénite diminuant avec une température croissante, celle-ci ne peut accommoder élastiquement les importantes déformations. L'accommodation se fait par déformation plastique de l'austénite adjacente. Il en résulte une augmentation locale de la densité de dislocations, donc un phénomène de consolidation qui finit par bloquer le mouvement de l'interface (figure I-14). Cette déformation plastique localisée arrête la croissance des plaquettes de ferrite, de telle sorte que chaque sous-unité atteint une taille limite, largement inférieure à la taille de grain de l'austénite.

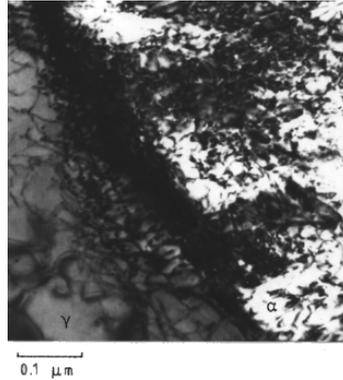


Figure I-14 : *Importante densité de dislocations à l'interface bainite (clair)/austénite(sombre) [BE80].*

Les relations d'orientation entre la bainite et l'austénite sont celles décrites par les relations du type Kurdjumov-Sachs. La bainite se forme sur des plans cristallographiques particuliers, mais l'indice du plan d'habitat présente une importante dispersion (figure I-6) par rapport à la martensite. En effet, ces facteurs varient avec la température de transformation, le temps et la composition.

Il a été souligné précédemment que la bainite supérieure se formait en deux étapes distinctes, la première étant la formation de ferrite bainitique dans laquelle le carbone a une très basse limite de solubilité (< 0.02 % en poids). La seconde étape est la croissance de la ferrite qui provoque un enrichissement de l'austénite résiduelle en carbone. Il est possible que de la cémentite précipite dans les couches d'austénite entre les plaquettes (sous-unités). La quantité de cémentite dépend de la concentration en carbone de l'alliage. Une haute teneur en carbone conduit à une microstructure dans laquelle les plaquettes de ferrite sont séparées par des couches de cémentite. Si la teneur en carbone est faible, on aura une répartition de petites particules.

Les particules de cémentite et l'austénite dont elles proviennent, ont une relation d'orientation dite de "Pitsch":

$$[001]_{\text{Fe}_3\text{C}} \parallel [\bar{2} 25]_{\gamma}$$

$$[100]_{\text{Fe}_3\text{C}} \parallel [5 \bar{5} 4]_{\gamma}$$

$$[010]_{\text{Fe}_3\text{C}} \parallel [\bar{1} \bar{1} 0]_{\gamma}$$

De nombreux carbures sont susceptibles de précipiter depuis l'austénite, chaque particule ayant une relation d'orientation indirecte avec la ferrite, via la relation d'orientation ferrite/austénite.

Si des éléments d'alliage (silicium, aluminium,..), retardant la formation de cémentite, sont ajoutés en quantité suffisante, il est possible de supprimer la formation de cémentite. On obtient alors, pour la bainite supérieure, une microstructure ne présentant que de la ferrite bainitique et de l'austénite enrichie en carbone. La microstructure pourra également contenir de la martensite si l'austénite résiduelle se transforme au refroidissement.

### 1-5-2 Bainite inférieure

La bainite inférieure présente une microstructure et des caractéristiques cristallographiques proches de celles de la bainite supérieure. La principale différence étant que les particules de cémentite précipitent dans les plaques de ferrite. Il y a de ce fait, deux types de précipités, ceux qui se forment dans l'austénite enrichie en carbone qui sépare les plaquettes de bainite et ceux qui se forment dans la ferrite sursaturée. Ces derniers présentent la même relation d'orientation que les précipités qui se forment durant les traitements de revenu de la martensite. Cette relation est connue sous le nom d'orientation de Bagaryatski:

$$[001]_{\text{Fe}_3\text{C}} \parallel [\bar{1}01]_{\alpha}$$

$$[100]_{\text{Fe}_3\text{C}} \parallel [111]_{\alpha}$$

$$[010]_{\text{Fe}_3\text{C}} \parallel [\bar{1}2\bar{1}]_{\alpha}$$

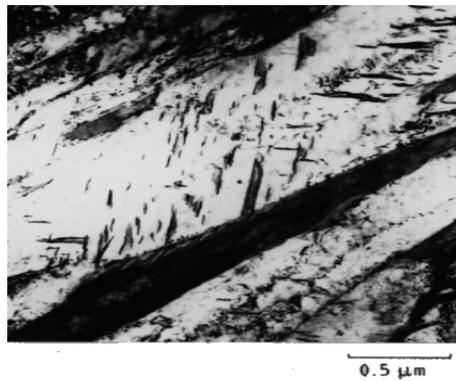


Figure I-15 : *Microstructure de la bainite inférieure* [BE80].

Les carbures présents dans la ferrite ne sont pas toujours nécessairement de la cémentite. Selon la température de transformation et la composition, d'autres carbures de transition peuvent précipiter en premier. Dans les aciers à haute teneur en carbone contenant plus de 1% (en poids) de silicium (qui retarde la précipitation de la cémentite), par exemple, on observe souvent la précipitation de carbures  $\epsilon$ .

Dans la bainite inférieure, par opposition à la martensite revenue, les particules de cémentite précipitent souvent de telle sorte qu'elles forment des réseaux parallèles à environ  $60^\circ$  de l'axe de la plaquette de bainite (figure I-16). Ce mode de précipitation particulier à la bainite inférieure, pourrait être attribué au fait que les précipités germent à l'interface ferrite/austénite, adoptant de ce fait une orientation qui satisfait au mieux les relations avec la ferrite et l'austénite.



Figure I-16 : *Orientations des particules de cémentite par rapport aux plaquettes de bainite* [BE80].

Les carbures présents dans la bainite inférieure sont extrêmement fins, faisant juste quelques nanomètres d'épaisseur et environ 500 de long. Comme ils précipitent dans la ferrite, la quantité de carbone rejetée dans l'austénite résiduelle est moins importante. Ceci induit une précipitation plus fine et moins importante entre les plaques de ferrite, en comparaison avec la microstructure de la bainite supérieure.

*En conséquence, la bainite inférieure présente une meilleure résilience que la bainite supérieure, ceci avec une plus haute limite d'élasticité. Les épais précipités de cémentite présents dans la bainite supérieure, sont des lieux privilégiés d'apparition de fissures ou de rupture par clivage.*

### 1-5-3 La transition bainite supérieure/bainites inférieure

Lorsqu'on abaisse la température de transformation (sous BS), on obtient de la bainite inférieure pour laquelle des carbures précipitent dans la ferrite. La précipitation dans l'austénite est de ce fait réduite. La figure I-11, montre schématiquement la différence entre les deux morphologies.

Aux hautes températures, la diffusion est si rapide que les précipités n'ont pas l'occasion de se former dans la ferrite, on obtient une microstructure de bainite supérieure. Il est possible que de la cémentite précipite depuis l'austénite enrichie en carbone.

Lorsque la température diminue, i.e lorsque le temps pour dessaturer la plaquette augmente, une partie du carbone peut former de fins précipités de carbures dans la ferrite, pendant que le reste est rejeté dans l'austénite où il forme éventuellement des précipités entre les plaquettes. C'est la microstructure de la bainite inférieure. Du fait que seule une fraction du carbone en excès diffuse dans l'austénite, les précipités qui s'y forment, sont beaucoup plus petits que ceux que l'on rencontre dans la bainite supérieure. Ceci explique que la bainite inférieure possède non seulement une meilleure résilience, mais également une plus haute limite d'élasticité que la bainite supérieure.

Un corollaire de ce mécanisme de transition est que l'on obtient toujours de la bainite inférieure dans les aciers à haute teneur en carbone. Inversement, dans les aciers bas carbone, le temps pour dessaturer une plaquette est si faible que seule de la bainite supérieure peut être obtenue, quelle que soit la température de transformation choisie entre celle de fin de formation de la perlite et celle de début de formation de martensite.

### 1-5-4 La bainite granulaire

Le terme de bainite granulaire est fréquemment employé pour décrire la bainite obtenue par refroidissement continu, notamment dans l'industrie où la plupart des aciers subissent des traitements non isothermes. Un bon exemple est l'industrie de production de l'énergie, où de larges composantes en aciers Cr-Mo sont refroidies naturellement depuis l'état austénitique pour obtenir une microstructure bainitique.

Au microscope électronique, la différence entre la bainite granulaire et la bainite ordinaire ne se voit pas, car les mécanismes de formation sont identiques. Par contre, la microstructure se formant progressivement lors du refroidissement, les lattes de bainite peuvent être assez épaisses. Observée au microscope optique, la microstructure semble présenter des blocs de bainite et d'austénite, d'où l'adjectif "granulaire" (figure I-17). Une caractéristique importante de la bainite granulaire est l'absence de carbures dans la microstructure. Le carbone rejeté dans l'austénite la stabilise, de telle sorte que la microstructure finale contienne de l'austénite, un peu de martensite à haute teneur en carbone, et de la ferrite.



Figure I-17 : *Bainite granulaire.*

#### 1-6 Traitement de revenu de la bainite et de la martensite

L'étendue et la vitesse des changements de microstructure et de propriétés dépendent nécessairement de l'écart à l'équilibre présenté par l'échantillon. On s'attend, de ce fait, que la bainite ait un comportement au revenu différent de celui de la martensite.

Au contraire de la martensite, la ferrite bainitique ne contient souvent qu'un faible excès de carbone en solution. La plus grande partie du carbone se trouve sous forme de particules de cémentite, qui sont par ailleurs plus grosses que celles présentes dans une martensite revenue. Pour le même acier, les effets d'un traitement de revenu sur une microstructure bainitique sont donc moins marqués que lors d'un revenu sur une structure martensitique.

La bainite se forme à des températures assez hautes, de sorte que la restauration a lieu pendant la transformation. En conséquence, le recuit d'aciers bainitiques à bas carbone n'entraîne qu'une faible restauration et de faibles modifications dans la morphologie et les particules de carbure, même à des températures de 700 °C (1h). On observe un adoucissement rapide lorsque la structure en plaques de la bainite fait place à une structure équiaxe. Ce changement s'accompagne d'une sphéroïdisation et croissance des particules de cémentite. Prolonger le revenu n'a que des effets minimes.

Au contraire des aciers martensitiques, de faibles variations (0.06-0.14 % en poids) dans la teneur en carbone n'ont que peu d'effet sur le revenu de la bainite. Le carbone ayant un important effet de renforcement par solution solide, la résistance de la martensite chute de manière importante lorsque le carbone précipite pendant le revenu. Dans la bainite, le carbone est essentiellement présent sous forme de gros précipités qui contribuent peu à sa résistance. Il n'est donc pas surprenant d'observer que l'effet du revenu dépend peu de la teneur globale en carbone.

La plupart des microstructures bainitiques présentent une quantité non négligeable d'austénite résiduelle. Un revenu à une température supérieure à 400°C entraîne sa décomposition en ferrite et carbures.

Les aciers bainitiques contenant de forts promoteurs de la précipitation de carbures (Cr, V, Mo, Nb) présentent un durcissement secondaire durant les revenus à haute température. Le phénomène de durcissement secondaire a lieu lorsque se produit une fine précipitation de carbures avec les éléments d'alliage, au dépend de la cémentite. La cémentite étant sous forme d'épaisses particules dans la bainite, le phénomène de durcissement secondaire y est relativement lent (si l'on compare avec la martensite).

L'utilisation d'aciers bainitiques au cuivre est particulièrement intéressante pour l'ingénierie lourde. Le traitement de revenu entraîne la formation de fines particules de cuivre qui contribuent à la résistance sans mettre en danger la résilience.

*En résumé, les comportements au revenu de la bainite et de la martensite, se distinguent nettement, la cause la plus importante étant la faible quantité de carbone en solution solide dans la bainite. Ceci implique que la microstructure bainitique est bien moins sensible au revenu, étant donné qu'il n'y a quasiment pas de perte de résistance par diminution de la quantité de carbone en solution. On observe d'importants changements lorsque la microstructure en plaquettes fait place à une microstructure équiaxe. La résistance n'est que légèrement affectée par la coalescence des particules de cémentite ou la restauration. Les aciers bainitiques présentent une étape de durcissement secondaire assez semblable à celle observée dans les aciers martensitiques; elle est liée à la précipitation de fines particules de carbures formés avec les éléments d'alliage.*

*La bainite et la martensite se différencient donc par leur morphologie, la distribution des orientations et la répartition du carbone. Ces trois paramètres jouent un rôle essentiel sur leur comportement mécanique et leur comportement en endommagement et rupture.*

## 2 Mécanismes élémentaires de la déformation plastique des monocristaux C.C.

La réponse des matériaux cristallins à une sollicitation mécanique, se traduit par un comportement linéaire réversible dit élastique, suivi d'un comportement irréversible non linéaire se caractérisant par une déformation résiduelle après décharge, dite déformation plastique (figure I-18).

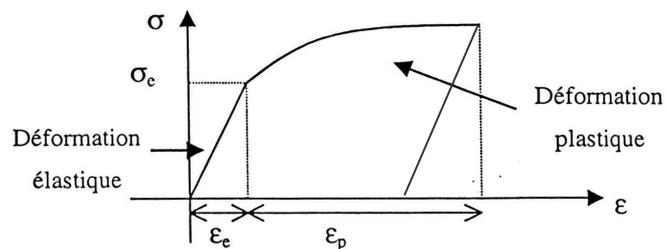


Figure I-18 : Modes de déformation des cristaux.

### 2-1 Elasticité des monocristaux à structure cubique centrée

La déformation élastique est due à une distorsion du réseau cristallin sous l'effet d'un chargement mécanique, celui-ci modifie les distances inter-atomiques à partir des distances d'équilibre «  $a$  », la force d'interaction atomique est la résultante entre les forces attractives et répulsives des atomes (figure I-19) La déformation élastique se caractérise par la proportionnalité de la contrainte et de la déformation, cette proportionnalité est caractérisée par le module d'élasticité qui dépend essentiellement de l'énergie de cohésion inter-atomique.

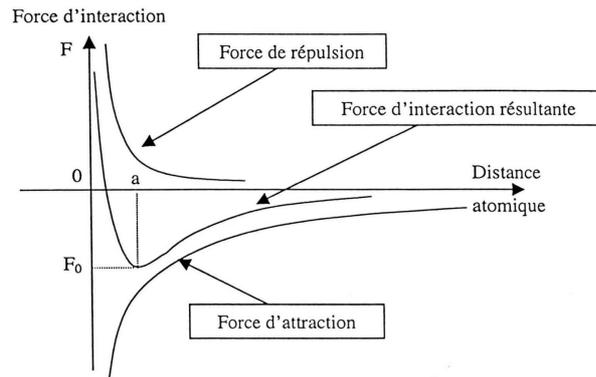


Figure I-19 : Evolution de la force d'interaction atomique en fonction de la distance inter-atomique.

### 2-1-1 Anisotropie de l'élasticité des monocristaux de structure cubique centrée

Du fait de l'anisotropie de la maille cubique centrée et des liaisons inter-atomiques, le comportement élastique des matériaux à structure cubique centrée est anisotrope. La notation matricielle de *VOIGT* du tenseur des modules d'élasticité de ces structures est :

$$\begin{bmatrix} C^e \\ \equiv \\ \equiv \\ \equiv \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11}^e & C_{12}^e & C_{12}^e & 0 & 0 & 0 \\ C_{12}^e & C_{11}^e & C_{12}^e & 0 & 0 & 0 \\ C_{12}^e & C_{12}^e & C_{11}^e & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44}^e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44}^e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44}^e \end{bmatrix}$$

Pour le fer $\alpha$ ,  $C_{11}= 200\text{GPa}$  ,  $C_{12}=120\text{Gpa}$  ,  $C_{44}=200\text{GPa}$

### 2-2 Mécanismes élémentaires de déformation des cristaux de structure cubique centrée

Le comportement mécanique des métaux à structure cubique centrée est fortement influencé par la température et par la vitesse de déformation. On définit une température critique (notée ici  $T_C$ ) caractéristique du matériau et à ne pas confondre avec la température de transition ductile –fragile  $T_T$ , bien que ces deux températures soient souvent proches. Pour le fer pur et une faible vitesse de déformation,  $T_C$  est de l'ordre de 300K, ce qui correspond à une température comprise entre 0,2 et 0,3  $T_f$  ( $T_f = 1260\text{K}$ ). La valeur de  $T_C$  est fortement influencée par la concentration et le type d'impuretés contenues dans le matériau.

Le comportement d'un monocristal de fer pur dans les deux intervalles de température, peut être schématisé par les deux courbes de traction de la figure I-20.

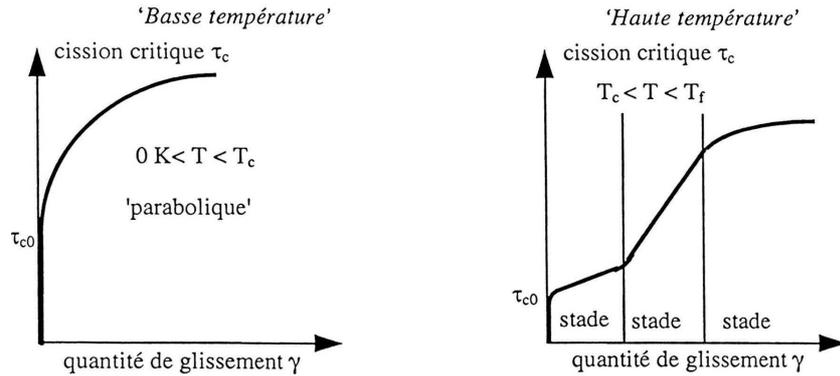


Figure I-20 : Comportement à froid et à chaud des monocristaux de structure C.C.

### 2-2-1 Systèmes de glissement

Pour les matériaux de structure cubique centrée, les directions de glissement sont celles de la famille  $\langle 111 \rangle$  qui correspondent aux directions ayant la plus forte densité atomique. Quant aux plans de glissement, leur nature n'est pas encore parfaitement définie. *Taylor* et *Elam*, ont mis en évidence l'activation de plans de glissement non cristallographiques mais subissant la cission maximale, tout au moins au dessus de  $T_C$ .

*Barret* et al ont observé que pour le fer alpha et dans un intervalle de température allant de  $-200^\circ\text{C}$  à  $500^\circ\text{C}$ , les plans de glissement actifs correspondaient à (110), (112) et (113), le premier étant le plus fréquemment activé.

Pour  $T < T_C$ , les observations en microscopie électronique à transmission ont mis en évidence l'existence de dislocations essentiellement de caractère vis, très rectilignes, ce qui est la conséquence d'une forte friction de réseau cristallin. La dissociation de l'énergie de cœur de ces dislocations vis, les rend peu glissiles et les incréments de glissement se font par des doubles décrochements 'double kink' le long des segments droits des dislocations vis. Les dislocations vis sont donc peu mobiles et sont à l'origine du durcissement parabolique des courbes de traction.

Pour  $T > T_C$ , les lignes de glissement sont sinueuses et composées de segments droits. Le glissement peut être comparé à celui d'un paquet de crayons hexagonaux, glissant les uns sur les autres. Selon *Franciosi*, les lignes de glissement sinueuses sont constituées de micro glissement sur (110) et (112), la combinaison des deux, donnant le troisième plan. Notons que les plans (112) ne sont pas des plans denses. La sinuosité des lignes de glissement observée lors de la déformation s'explique donc par la conséquence d'activation simultanée de deux systèmes de glissement colinéaires. Les dislocations à caractère vis qui sont activées simultanément, se déplacent par incréments de glissement successifs, en utilisant un mécanisme de recombinaison – dissociation – recombinaison indifféremment sur les deux plans de glissement colinéaires. Il ne s'agit pas de glissement dévié mais d'un mécanisme qui permet à deux systèmes de glissement d'être actifs simultanément, même si les quantités de glissement instantanées diffèrent d'un système à l'autre.

### 2-2-2 Les mécanismes élémentaires

Dans les CC, il existe trois mécanismes principaux à l'origine de la déformation plastique dont l'importance relative dépend de la température.

### 2-2-2-1 Déformation par doubles décrochements

Considérons une dislocation vis qui se déplace dans un plan de glissement ne présentant pas d'obstacle, sous l'effet de la cisssion appliquée  $\tau$ . Le mouvement de la dislocation est freiné par la résistance du réseau cristallin. Cette barrière énergétique peut être franchie par activation thermique. L'énergie de *Peierls* (énergie par unité de longueur de dislocation) dépend de la position de la dislocation dans le plan. Dans les cristaux CC, l'énergie de cœur des dislocations vis est minimale pour une configuration non planaire. Ceci se traduit, pour l'énergie de *Peierls*, par l'existence d'une succession de pics et de vallées parallèles au vecteur de *Burgers* et présentant la même périodicité que le réseau cristallin. A basse température, les dislocations adoptent une configuration de basse énergie qui se traduit par de longs segments vis. L'énergie nécessaire pour mouvoir un segment de dislocation vis étant bien supérieure à celle nécessaire pour un segment de dislocation coin, le passage d'une vallée de *Peierls* à l'autre se traduit par la création, sur le segment vis, de doubles décrochements coin et le mouvement des décrochements entraîne celui de la dislocation vis comme l'indique la figure I-21. La nucléation du double décrochement est un phénomène activé thermiquement. La contrainte de *Peierls*  $\tau_p$ , qui s'oppose au mouvement, décroît avec la température et devient négligeable lorsque T atteint  $T_C$ .

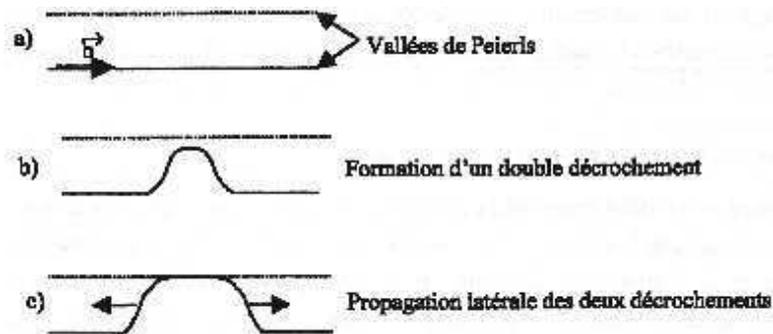


Figure I-21 : Formation et propagation d'un double décrochement sur une ligne de dislocation vis.

### 2-2-2-2 Interactions des dislocations mobiles avec les arbres de la forêt

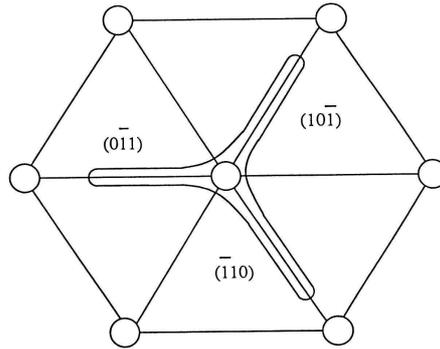
Dans la théorie du durcissement par les arbres de la forêt le mouvement des dislocations est arrêté par les dislocations secondaires qui percent leur plan de glissement. Lorsque que la dislocation mobile et la dislocation obstacle s'interceptent, il se forme deux crans (jonctions). L'énergie nécessaire à la formation de ces crans dépend de la force d'interaction entre les deux dislocations. Cette énergie ne dépend de la température qu'à travers le module d'Young.

### 2-2-2-3 La tension de ligne

Lorsqu'une dislocation est ancrée sur deux obstacles, elle se courbe sous l'effet de la contrainte appliquée, augmentant ainsi son énergie (tension de ligne).

### 2-2-2-4 La dissociation du coeur des dislocations

Les dislocations à caractère vis ont une structure de cœur tridimensionnelle. Elles se décomposent en trois dislocations partielles disposées symétriquement (figure I-22).



**Figure I-22 :** Dissociation du cœur des dislocations à caractère vis dans les structures cc.

Des observations à l'échelle du cœur des dislocations partielles ont mis en évidence la non planéité et l'asymétrie de celles-ci sur des plans de types  $\{112\}$ . Par conséquent, cette dissociation impose que les dislocations à caractère vis soient difficilement glissiles et que leur mouvement élémentaire ne se fasse pas que sur des plans de types  $\{110\}$ , mais aussi sur ceux de type  $\{112\}$ . Ces mécanismes sont responsables de l'asymétrie du glissement cristallographique qui a été mise en évidence pour la première fois par Taylor sur des monocristaux de laiton  $\beta$ .

#### 2-2-2-5 Asymétrie du glissement de type $\{112\}$

L'activation des systèmes de la famille  $(112)$  dépend du sens de la direction de glissement. Il faut donc considérer non pas 12 systèmes de glissement, mais 2 familles  $(112)$ , soit 24 systèmes. Les deux familles se distinguent par une cission critique différente. La cission critique initiale des systèmes dits faciles ne diffère pas de celle des systèmes de la famille  $\{110\}$ . En revanche, pour ceux dits difficiles, les cissions critiques initiales sont plus grandes.

#### 2-2-2-6 Critère de Schmid

Si on considère un monocristal soumis à un champ de contrainte uniaxial représenté par la figure I-23 (traction ou compression simple), la contrainte de cisaillement dans le plan de glissement et dans la direction de glissement est appelée cission résolue ou cission réduite  $\tau$  et est donnée par la relation suivante :

$$\tau = \frac{F}{S} \cos\phi \cdot \cos\lambda = \sigma_N \cos\phi \cdot \cos\lambda$$

Où  $F$  est la norme de la force appliquée,

$S$  est la section droite de l'éprouvette de traction,

$\sigma_N$  est la contrainte normale,

$\phi$  est l'angle entre la direction de traction et la direction de glissement  $\underline{m}$ ,

$\lambda$  est l'angle entre la direction de traction et la normale au plan de glissement  $\underline{n}$ .

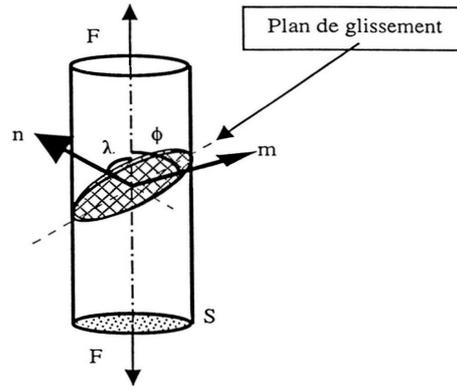


Figure I-23 : Représentation d'un monocristal soumis à un essai de traction.

Dans le cas d'une sollicitation quelconque, la contrainte de cisaillement est obtenue en faisant le produit doublement contracté du tenseur des contraintes de CAUCHY et du tenseur résultants du produit tensoriel des vecteurs unitaires des direction et plan de glissement :

$$\tau = \underline{\underline{\sigma}} : (\underline{n} \otimes \underline{m}) = \underline{n} \cdot \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{m} = \sum_{i=1}^{i=3} \sum_{j=1}^{j=3} n_i \sigma_{ij} m_j$$

Pour qu'un système de glissement (k) soit actif et le reste, il faut que la cission résolue  $\tau^{(k)}$  sur celui-ci soit supérieure à une valeur critique  $\tau_c^{(k)}$  appelée cission critique.

$$\tau^{(k)} = \tau_c^{(k)} \text{ et } \dot{\tau}^{(k)} = \dot{\tau}_c^{(k)}$$

A basse température, les cissions initiales sur les différentes familles de glissement sont différentes, mais cette différence s'estompe lorsque la température augmente, comme le montre la figure I-24.

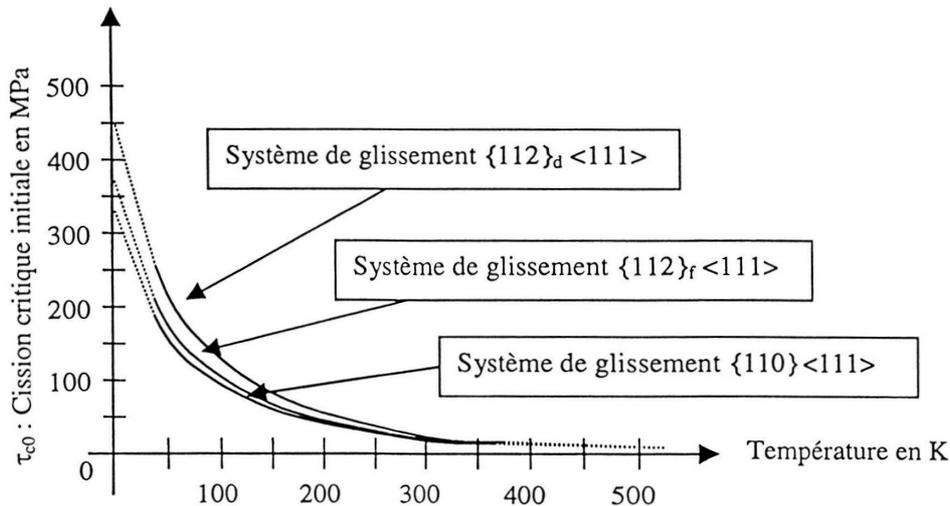


Figure I-24 : Influence de la température sur les cissions critiques initiales des métaux c.c.

Dans le cas où la valeur des cissions critiques initiales est la même pour tous les systèmes de glissement, le plan de glissement (et la direction de glissement) du système susceptible d'être activé le premier est celui qui présente la plus grande cission réduite ou, dans le cas d'un essai uniaxial, le plus grand facteur d'orientation  $f_{or} = \cos \phi \cos \lambda$ .

Lors d'un essai de traction la rotation plastique sur le système primaire entraîne une diminution de l'angle entre la direction de glissement primaire et l'axe de traction.

Pour  $T > T_C$ , la courbe de traction d'un monocristal CC est très proche de celle d'un CFC, car le mécanisme de durcissement prépondérant est le durcissement lié aux arbres de la forêt. Donc, pour un monocristal en glissement simple, on observe trois stades de déformation dont l'amplitude dépend de la température, de l'orientation et de la vitesse de déformation.

- Ø Stade I : la déformation plastique a lieu, sur un seul système de glissement appelé système de glissement primaire. La rotation du réseau cristallin conduit à l'activation d'un second système de glissement
- Ø Stade II : la déformation plastique a lieu sur au moins deux systèmes de glissement distincts. Le système de glissement primaire qui est le même que dans le stade I et un deuxième système de glissement, appelé secondaire, dont l'activation a lieu au début du stade II. Les interactions élastiques entre systèmes conduisent à la formation de verrous qui sont des obstacles à l'écoulement plastique. Ces obstacles sont à l'origine de la pente du stade II.
- Ø Stade III : La formation d'obstacles au glissement plastique permet l'activation d'un troisième système qui va assurer la déformation en changeant de plan pour éviter les obstacles. Ce mode de déformation est appelé glissement dévié, il permet un adoucissement du taux d'écroutissage.

En réalité, les courbes de traction obtenues sur du fer pur, suivent plus au moins bien ce schéma, comme le montre la figure I-25.

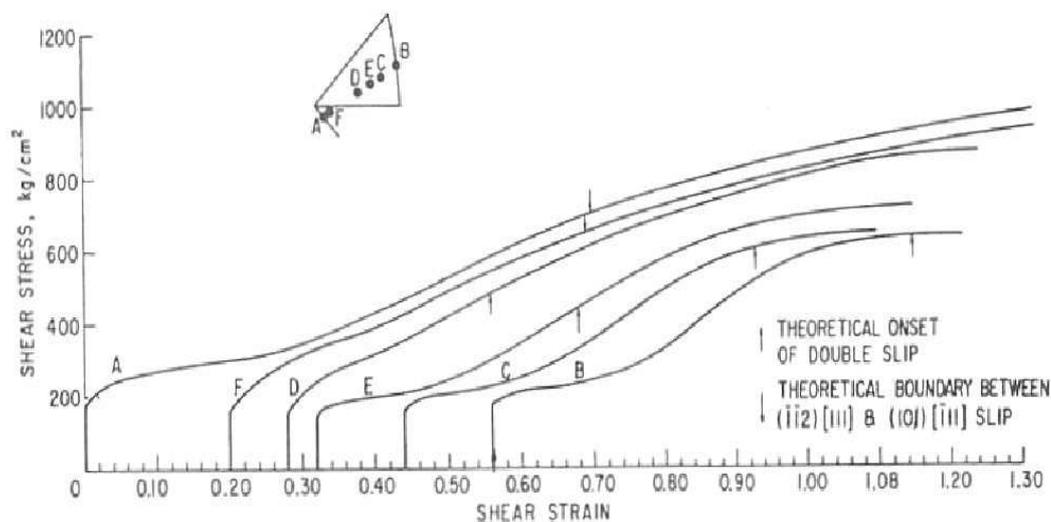


Figure I-25 : Courbes de traction du fer pur.

#### 2-2-2-7 Rotation du réseau cristallin

Le glissement plastique, à condition qu'il soit libre, ne modifie pas l'orientation du réseau cristallin par rapport aux axes macroscopiques. En glissement simple, la rotation plastique s'accompagne, pendant le stade I, de la rotation de la direction de glissement vers l'axe de traction. En revanche, les conditions aux limites, tel l'alignement des têtes de l'éprouvette, imposent généralement une rotation du réseau cristallin pour compenser totalement ou en partie, la rotation plastique. Dans ce cas, la rotation du repère cristallin dans le repère macroscopique (la rotation de l'axe de traction dans le repère cristallin) suit un chemin bien

défini, comme l'indique la figure I-26. Notons que l'axe de zone (001)(111) est un axe instable et que l'axe de zone (001) (011) est, en principe, un axe stable, bien que des mécanismes "d'overshoot" aient été fréquemment observés.

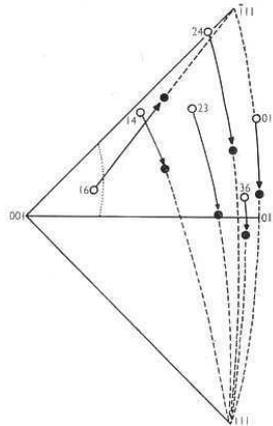


Figure I-26 : Rotation de l'axe de traction avec la déformation [JAO65].

### 2-3 Influence des impuretés sur le comportement des métaux CC :

Le comportement des métaux à structure cubique centrée, contrairement aux métaux à structure cubique à faces centrées, est fortement influencé par la nature et la concentration des impuretés qu'ils contiennent. Les propriétés mécaniques des métaux purs à structure CC ne sont pas parfaitement connues, puisqu'une faible concentration en impuretés influe d'une façon considérable sur le comportement de celui-ci, et que l'élaboration de métaux purs à structure CC est difficile.

## 3 Modélisation du comportement des monocristaux et polycristaux C.C.

### 3-1 Loi d'écoulement

#### 3-1-1 Ecoulement plastique

Dans ce type d'approche, la sensibilité du matériau au changement de vitesse n'est pas considérée. Sur un système particulier (s), il y a déclenchement de la plasticité dès que le critère de Schmid est atteint :

$$|\tau^s| = \tau_c^s \text{ et } \dot{\tau}^s = \dot{\tau}_c^s \quad (\text{I-1})$$

Pour chaque système de glissement, l'équation (I-1) définit deux hyperplans dans l'espace à 6 dimensions des contraintes. Pour l'ensemble des systèmes, ce critère définit une hypersurface de charge (S) qui contient tous les états de contraintes admissibles. L'écoulement est alors déduit suivant une loi de normalité par rapport à la surface de charge. Le principal problème de cette approche réside dans l'indétermination des quantités de glissement lorsque l'état de contrainte  $\underline{\sigma}$  correspond à un vertex de la surface de charge.

### 3-1-2 Ecoulement viscoplastique

La modélisation viscoplastique des lois d'écoulement est basée sur la théorie du mouvement thermiquement activé des dislocations [FIV93]. Historiquement, la plupart des travaux sur ce sujet ont porté sur des matériaux CFC pour lesquels la contrainte effective  $\sigma^*$  (cission effective  $\tau^*$ ) est faible en regard de la contrainte interne  $\sigma_\mu$  (cission interne  $\tau_\mu$ ) qui est liée à la résistance des obstacles. La contrainte appliquée est la somme de la contrainte effective et de la contrainte interne :  $\tau = \tau^* + \tau_\mu$ .

Dans le cadre des phénomènes activés thermiquement, la vitesse de déformation est donnée par :

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 \exp\left(\frac{-\Delta G}{KT}\right) \quad (\text{I-2})$$

où  $\Delta G$  est l'enthalpie libre d'activation,  $\dot{\epsilon}_0$  dépend de la densité de dislocations mobiles.

$$\Delta G = \Delta G_0 \left[ 1 - \left( \frac{\sigma^*}{\sigma_0} \right)^p \right]^q \quad (\text{I-3})$$

où  $\Delta G_0$  est l'énergie libre d'activation moyenne, nécessaire pour surmonter l'obstacle en l'absence de force appliquée.

Les paramètres p et q sont respectivement compris dans les intervalles  $0 \leq p \leq 1$  et  $1 \leq q \leq 2$

$\sigma_0$  correspond à la résistance des obstacles.

Une autre forme de la vitesse de glissement est donnée par:

$$\dot{\gamma} = \rho_m b^2 v_d \exp\left[\frac{-\Delta G_0 + \Delta V^* \tau^*}{kT}\right] \quad (\text{I-4})$$

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_0 \exp\left[-\frac{\Delta G_0}{kT}\right] \exp\left[\frac{\tau_\mu \Delta V^*}{kT} \left(\frac{\tau}{\tau_\mu} - 1\right)\right] \quad (\text{I-5})$$

où  $T$  est la température,  $K$  la constante de Boltzman,  $v_D$  la fréquence de Debye,  $\rho_m$  la densité de dislocations mobiles,  $\Delta V^*$  et  $\Delta G_0$  respectivement les volume d'activation et gain d'énergie liés au franchissement de l'obstacle.

On étend cette loi à chaque système de glissement (s) et l'évolution de la vitesse de glissement peut alors être modélisée si  $\frac{\tau^s}{\tau_\mu^s} \approx 1$  par :

$$\dot{\gamma}^s = \rho_m^s b^2 v_D \exp\left(\frac{-\Delta G_0}{KT}\right) \left(\frac{\tau^s}{\tau_\mu^s}\right)^{\frac{\tau_\mu^s \Delta V^*}{KT}} \quad (\text{I-6})$$

En posant  $m = \frac{\tau_\mu^s \Delta V^*}{KT}$  et  $\dot{\gamma}^s = \rho_m^s b^2 v_D \exp\left(\frac{-\Delta G_0}{KT}\right)$ , on retrouve l'expression de la loi bien connue :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0^s \left( \frac{\tau^s}{\tau_\mu^s} \right)^m \quad (\text{I-7})$$

Pour un matériau CC, cette relation est acceptable dès lors que celui-ci est déformé au-delà de la température de transition. L'effet de tension de ligne sur les dislocations est alors prédominant sur celui du double décrochement (fortement influencé par la forte friction de réseau) pour franchir un obstacle. En dessous de cette température, il ne semble pas exister pour l'instant de modélisation pertinente du phénomène.

La modélisation viscoplastique du comportement a aussi été établie [CAI87] de manière phénoménologique en considérant la partition suivante :

$$|\tau^s - x^s| = r^s + k^s + K \dot{\gamma}_v^s \frac{1}{n} \quad (\text{I-8})$$

$x^s$  est une composante cinématique associée à la présence de structures hétérogènes de dislocations,  $r^s$  est un écrouissage isotrope lié aux interactions de type forêt,  $k^s$  est la contrainte à partir de laquelle le glissement s'opère sur le système (s) et  $\tau_v^s = K \dot{\gamma}_v^s \frac{1}{n}$  est une contribution visqueuse. Ainsi, la vitesse de glissement  $\dot{\gamma}_v^s$  s'exprime par :

$$\dot{\gamma}_v^s = \left\langle \frac{|\tau^s - x^s| - r^s - k^s}{K} \right\rangle^n \text{sgn}(\tau^s - x^s) \quad (\text{I-9})$$

### 3-2 Lois d'écrouissage

L'écrouissage des mono et polycristaux est un sujet complexe où la détermination de lois capables de rendre compte de l'effet de durcissement en déformation plastique passe par la compréhension des phénomènes physiques responsables. Le principal phénomène de durcissement est produit par la capacité des dislocations forêt immobiles perçant un plan de glissement de rendre plus difficile le déplacement, voire de bloquer une dislocation se mouvant sur ce même système, nécessitant alors une augmentation de la cisssion appliquée sur ce système. De manière générale, pour les polycristaux, on peut distinguer 4 stades de la déformation. Les 3 premiers stades ont déjà été décrits précédemment. On pourra tout de même noter la quasi absence du stade I dans la déformation des polycristaux. Cependant, lors de grandes déformations plastiques, le taux d'écrouissage décroît en stade III puis atteint une valeur limite voire diminue [GIL93] ou s'accroît légèrement. Il est alors environ 50 fois plus faible qu'au début du stade III. Cette étape du durcissement est appelée stade IV de l'écrouissage. On peut remarquer (figure I-18) que ce stade, tout comme le stade III montre une dépendance en température. Il n'y a pas à l'heure actuelle de théorie unifiée expliquant l'apparition et la persistance du stade IV aux basses et moyennes températures.

- Ø *Rollet et al* [ROL88] attribue l'écrouissage en stade IV à la présence de débris accumulés lors d'évènements de restauration dynamique tout au cours du stade III et qui seraient en fait difficile à annihiler.
- Ø *Prinz et Argon* [PA84] considèrent que ce durcissement est la conséquence de l'interaction entre dislocations glissiles contenues à l'intérieur des cellules. Il est à noter que ce phénomène présente des similarités avec l'écrouissage en stade I, à la différence près qu'au cours de celui-ci, l'écrouissage est principalement dû aux contraintes induites par les paquets de dislocations.

Ø Argon et Haasen [AH93] donnent une autre explication et la modélisent à l'aide d'un modèle biphasé. La désorientation croissante entre cellules au travers des parois entraînerait des contraintes à longue distance induisant un mouvement plus difficile des dislocations glissiles. De même, Hughes et Hansen [HH00] attribuent, à partir d'observations microstructurales, l'augmentation de la contrainte en stade IV à deux contributions, l'une étant la désorientation croissante au travers des IDBs («*Incidental Dislocation Boundaries*»), (figure I-28), et l'autre la variation de distance inter-GNBs («*Geometrical Necessary Boundaries*»).

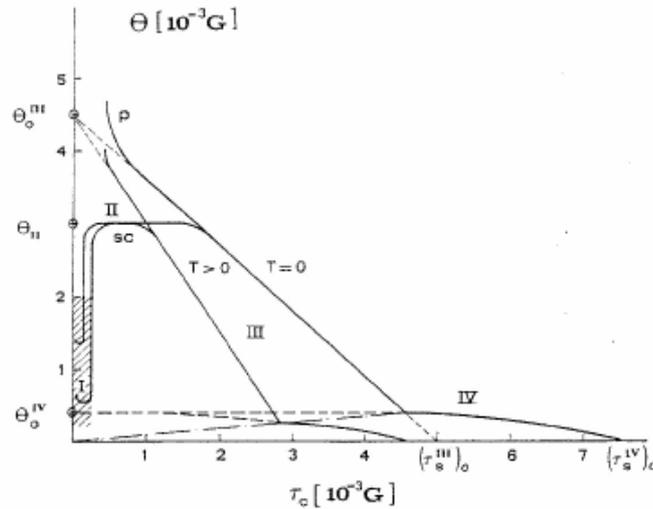


Figure I-27 : Evolution complète idéalisée du taux d'écroutissage  $\theta = \frac{\partial \sigma}{\partial \epsilon}$  pour des mono- (sc) et polycristaux (p) CFC et CC au delà de la température de transition [GIL93].

$(\tau_s^{III})$  est la contrainte à partir de laquelle l'écroutissage saturerait en l'absence de stade IV, au zéro absolu.

Plus généralement, une manière simple de modéliser l'écroutissage a été proposée dès l'apparition de la théorie de la microplasticité par Taylor. Elle conduit à relier un incrément de cission critique nécessaire pour activer le glissement plastique à un incrément de glissement par la relation :

$$\dot{\tau}_c^s = \sum_u h^{su} |\dot{\gamma}^u| \quad (I-10)$$

Dans l'hypothèse de Taylor, les termes de la matrice  $h$  restent constants tout au long de la déformation. Seules sont distinguées les influences d'auto-écrouissage et d'écrouissage latent grâce aux termes respectifs  $h^{ss}$  et  $h^{su}$ ,  $u \neq s$ . Cependant, au cours de la déformation, sous l'accumulation de défauts cristallins et de leur arrangement, il semble peu évident que cette matrice reste constante et de nombreuses tentatives ont vu le jour pour améliorer cette description de l'écrouissage. Dans la suite, sont présentés différents modèles d'écrouissage, développés dans le but de simuler certaines étapes particulières du comportement des mono (stade I, II et III) et polycristaux (stade III et IV en particulier).

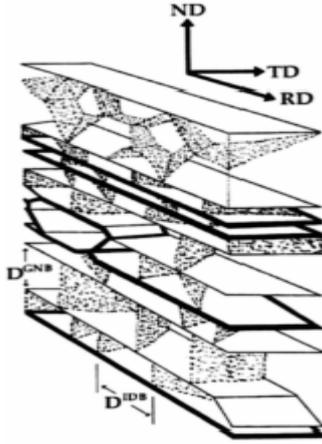


Figure I-28 : Schéma simplifié des microstructures observées en grandes déformations de laminage. Les plans dessinés en traits fins sont dénommés LBs (Lamellar Boundaries) joints par des IDBs (en pointillés) de faibles désorientations. Ces LBs sont en fait des GNBs dans le sens où ils séparent des zones où le glissement est réalisé sur des systèmes différents. Les LBs en traits gras correspondent au cas d'un joint de grand angle [HH00].

### 3-2-1 Modèles phénoménologiques d'écroutissage en microplasticité

**Modèle de Pierce, Asaro et Needleman** [PAN83] : Ce modèle tient compte de la non linéarité de la matrice  $h$  en fonction de la déformation. Plus précisément, son évolution dépend du glissement cumulé  $\gamma$  sur les systèmes actifs.

$$h^{su} = qh(\gamma) + (1 - q)h(\gamma)\delta^{su}, \delta^{su} \text{ symbole de Kröneckner}$$

$$h(\gamma) = h_0 \cdot \text{sech}^2\left(\frac{h_0\gamma}{\tau^s - \tau_0}\right) \quad (\text{I-11})$$

$h_0$  est un module initial d'écroutissage,  $\tau_0$  est la cission d'écoulement initiale, identique pour tout système de glissement. Par construction, cet écroutissage est anisotrope dès lors que le paramètre  $q$ , caractérisant la résistance des systèmes latents, est différent de 1. Les auteurs choisissent d'ailleurs une valeur de  $q$  comprise entre 1 et 1.4, impliquant par la même, une prépondérance des systèmes latents sur l'écroutissage. De plus, lorsque la déformation augmente  $h$  sature et tend vers 0.

**Modèle de Kalidindi et al** [BEDKD01] : De la même manière que précédemment, l'écroutissage est ici décrit, à l'aide d'une fonction puissance :

$$h^{su} = h_0 \left(1 - \frac{\tau^s}{\tau_\alpha}\right)^a \quad (\text{I-12})$$

Pour un aluminium pur, les valeurs de  $h_0$ ,  $\tau_\alpha$  et  $a$  sont prises respectivement égales à 75, 63 MPa et 2.25. Il est à noter que  $\tau_\alpha$  n'est pas la valeur initiale de la cission critique d'activation du glissement, valeur établie à 31 MPa, si bien que le sens physique de ce paramètre est mal défini.

**Modèle de Kocks** [KOC76], [SRZ98] : Ici, l'évolution de la cission critique d'activation du glissement est la même quel que soit le système de glissement. Ainsi, la matrice d'écroutissage  $h$ , bien que non constante, ne contient que des termes  $h_0$  identiques définis par :

$$h_0 = H_0 \left(\frac{\tau_{sat} - \tau_c}{\tau_{sat} - \tau_i}\right) \quad (\text{I-13})$$

où  $H_0$  et  $\tau_i$  sont respectivement des module d'érouissage et cission critique initiaux ( $H_0 = 58.4$  MPa,  $\tau_i = 27.2$  MPa pour l'aluminium) et  $\tau_{sat}$  est la cission à saturation de l'érouissage reliée à l'état de déformation par :

$$\tau_{sat} = \tau_{sat}^0 \left( \frac{\sum_s \dot{\gamma}^s}{\dot{\gamma}^0} \right)^m \quad (\text{I-14})$$

$\tau_{sat}^0$ ,  $\dot{\gamma}^0$  et  $m$  sont des paramètres matériaux, dont les valeurs sont fixées pour l'aluminium à 61.8 MPa,  $5.0 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  et 0.005 respectivement.

**Modèle de Cailletaud** [CAI87] : L'approche de *Cailletaud* est une approche pragmatique consistant à transposer les acquis de la théorie de macroplasticité à l'échelle du cristal. Bien que discutable sur l'absence de relations claires avec les phénomènes physiques mis en jeu, elle n'en reste pas moins une méthode encore largement utilisée et est très adaptée à la prévision du comportement cyclique. Deux variables d'érouissage sont définies, une d'origine cinématique  $x^s$  suivant une loi de type *Armstrong-Frederick*, l'autre d'origine isotrope  $r^s$ .

$$\begin{cases} x^s = C \alpha^s \\ \dot{\alpha}^s = \dot{\alpha}^s - d |\dot{\gamma}^s| \alpha^s \end{cases} \quad (\text{I-15})$$

$$r^s = r_0 + q \sum_{u=1}^N H^{su} \left( 1 - e^{-b \int_0^t |\dot{\gamma}^u| dt} \right) \quad (\text{I-16})$$

$r_0$ ,  $C$  et  $d$  sont des constantes matériaux à déterminer.

Pour tous ces modèles, on peut noter qu'il n'y a pas prise en compte des aspects physiques de la plasticité pour décrire le comportement du cristal. Cependant, tous ces modèles s'attachent néanmoins à faire en sorte que le taux d'érouissage décroisse lorsque la déformation augmente afin de rendre compte, du mieux de leurs capacités, de la déformation en stades I, II et III. Pour cela, la prise en compte de variables internes découlant de considérations physiques a été effectuée dans de nombreux modèles.

3-2-2 Modèles d'érouissage en plasticité cristalline intégrant la densité de glissement comme variable interne

**Modèle de Estrin, Mecking et Kocks** [EM84], [MK81], [KOC76] : Ce modèle est un des premiers à avoir pris en compte la notion de densité de dislocations comme variable d'érouissage. En effet, il existe, depuis longtemps, une relation empirique entre la densité de dislocations et la contrainte d'écoulement du type :

$$\sigma = \sigma_0 + M \alpha \mu b \sqrt{\rho} \quad (\text{I-17})$$

$\sigma_0$  provient de la friction de réseau ainsi que de la contribution moyenne des impuretés (interstitiels et précipités),  $M$  est le facteur de *Taylor* moyen,  $\alpha$  est un paramètre matériau généralement pris entre 0.1 et 0.5,  $\mu$  est le module de cisaillement isotrope et  $b$  la norme du vecteur de *Burgers*. Pour évaluer l'évolution de la contrainte d'écoulement avec la déformation, une équation différentielle donnant la variation de la densité de dislocations est proposée, prenant en compte l'effet de durcissement dû aux interactions entre dislocations mobiles ainsi que la diminution progressive du taux d'érouissage avec la déformation par développement progressif du glissement dévié.

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon^p} = M(k_1\sqrt{\rho} - k_2\rho) \quad (\text{I-18})$$

Le premier terme de la différence dans le second membre correspond à la production et le second à l'annihilation de dislocations. L'écriture proposée est réalisée dans un cadre isotherme. Cependant, de ce «*protomodèle*» comme le définissent les auteurs, ont découlé de nombreuses variantes, afin de tenir compte des effets de vitesse ainsi que de température sur le comportement.

Le taux d'écrouissage suit une loi de type *Voce* :

$$\theta = \theta_{II} \left( 1 - \frac{\sigma}{\sigma_s} \right) \quad (\text{I-19})$$

Où  $\theta_{II}$  est le taux d'écrouissage à contrainte nulle et  $\sigma_s$  la contrainte d'écoulement à l'équilibre entre production et annihilation de dislocations. Il s'ensuit que le stade IV n'est pas prévisible.

Bien que donnant des résultats remarquables pour décrire le comportement de matériaux polycristallins, cette loi ne permet pas de modéliser les formations de textures induites par la déformation, ainsi que le comportement à trois stades du monocristal, le stade I de l'écrouissage s'introduisant sous l'effet prépondérant de la rotation de réseau cristallin.

**Modèle de *Tabourot et al*** [TRT93], [TAB92], [DRR00] : Afin de développer une loi de comportement du monocristal CFC incorporable dans un code aux éléments finis, *Tabourot* a repris les concepts fondamentaux introduits par *Kocks et al* en introduisant les densités de dislocations sur chaque système de glissement comme variables internes. Partant du principe que la cission critique d'activation du glissement sur un système donné n'est dépendant que de la densité de dislocations perçant le plan de glissement, elle n'est donc pas identique pour tout système. Reprenant l'étude de *Franciosi* [FRA78] sur l'écrouissage latent du monocristal CFC, il réécrit la cission critique comme :

$$\tau_c^s = \mu b \sqrt{\sum_t a^{st} \rho^t} \quad (\text{I-20})$$

la matrice  $a^{st}$  caractérisant les interactions entre familles de systèmes de dislocations. L'évolution des densités de dislocations est de manière identique dépendante du système de glissement considéré. Elle découle de la partition de la densité totale en densités mobiles  $\rho_m^s$  et immobiles  $\rho_i^s$ .

$$\rho^s = \rho_m^s + \rho_i^s \quad (\text{I-21})$$

sachant que la densité de dislocations immobiles est très grande en regard des mobiles

$$\rho_m^s \ll \rho_i^s \quad (\text{I-22})$$

L'évolution de la densité de dislocations mobiles provient de trois termes : production ( $r_p^s$ ), annihilation ( $r_{ma}^s$ ) et immobilisation ( $r_{ia}^s$ )

$$\dot{\rho}^s = r_p^s - r_{ma}^s - r_{ia}^s \quad (\text{I-23})$$

L'évolution de la densité de dislocation immobiles est due à un accroissement provenant de l'immobilisation des dislocations mobiles ( $r_i^s$ ) et à une diminution due à l'annihilation de dislocations immobiles ( $r_{ia}^s$ )

$$\dot{\rho}_i^s = r_i^s - r_{ia}^s \quad (\text{I-24})$$

La production de dislocations immobiles correspond à la quantité de dislocations immobilisées en un temps donné.

$$r_i^s = \frac{\rho_m^s |\bar{v}^s|}{\Lambda^s} \quad (\text{I-25})$$

où  $\bar{v}^s$  est la vitesse moyenne des dislocations mobiles sur le système ( $s$ ) et  $\Lambda^s$  le libre parcours moyen.

$$\Lambda^s = \frac{K}{\sqrt{\sum_{t \neq s} \rho^t}} \quad (\text{I-26})$$

$\Lambda^s$  est proportionnel à la distance moyenne entre dislocations perçant ce même plan de glissement.

Et avec la relation d'*Orowan*,

$$|\dot{\gamma}^s| = \rho_m^s b |\bar{v}^s| \quad (\text{I-27})$$

L'équation I-25 se réécrit :

$$r_i^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b \Lambda^s} \quad (\text{I-28})$$

En considérant que, sur un court intervalle de temps  $\frac{\bar{v}^s}{\Lambda^s}$ , la densité de dislocations mobiles évolue peu ( $\dot{\rho}_m^s \approx 0$ ), en utilisant les équations I-20 et I-21 et en différentiant l'équation I-22 par rapport au temps, l'évolution de la densité de dislocations totale sur un système ( $s$ ) s'écrit :

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b \Lambda^s} - r_{ia}^s \quad (\text{I-29})$$

Le taux d'annihilation de dislocations immobiles suit une loi proposée par *Essman* et *Mughrabi* [EM79] et s'écrit :

$$r_{ia}^s = 2 \frac{y_c}{b} \rho_i^s |\dot{\gamma}^s| \quad (\text{I-30})$$

En combinant les équations I-30 et I-27 et à l'aide de l'équation 24, on aboutit alors à une écriture de l'évolution des densités de dislocations sur un système de glissement ( $s$ ), équation généralisée du modèle de *Kocks* et *al.*

$$\dot{\rho}^s = \frac{|\dot{\gamma}^s|}{b} \left( \frac{\sqrt{\sum_{t \neq s} \rho^t}}{K} - 2 y_c \rho^s \right) \quad (\text{I-31})$$

Par dérivation par rapport au temps de l'équation I-31, en introduisant l'équation I-28, l'expression de la matrice d'écroissage  $h^{su}$  peut être obtenue :

$$h^{su} = \frac{\mu}{2} a^{su} \frac{1}{\sqrt{\sum_t a^{st} \rho^t}} \left( \frac{\sqrt{\sum_{t \neq s} \rho^t}}{K} - 2y_c \rho^s \right) \quad (I-32)$$

Cette matrice est fortement non linéaire. Il n'est pas sûr qu'elle reste symétrique au cours de la déformation. Ce modèle d'écroissage traduit correctement les 3 stades d'écroissage du monocristal orienté initialement en glissement simple. De plus, son écriture dans un cadre en grandes déformations permet de prévoir la rotation de réseau cristallin [TAB92].

Cas particulier de l'écroissage en grandes déformations du polycristal : prise en compte du stade IV

Dans la section précédente ont été présentées différentes théories pour expliquer les mécanismes physiques responsables du stade IV, conduisant leurs auteurs à élaborer des modèles. La plupart d'entre eux sont en fait des modèles explicatifs, mais dont l'intérêt, pour l'utilisation en simulation numérique de la prévision de textures, est faible. Nous présentons donc ici quelques modèles développés pour prévoir le comportement de polycristaux soumis à de fortes déformations et intégrables dans des modèles de passage micro-macro ou aux éléments finis.

**Modèle de Estrin et al.** [ETMB98], [TME01] : Ce modèle viscoplastique a été développé pour simuler le comportement de polycristaux déformés en torsion. Il reprend les principes d'une structure biphasée en considérant une phase dure (les murs de dislocations) et une phase molle (les cellules). La cisssion subie par un plan de glissement est alors obtenue par la moyenne

$$\tau^s = f\tau_w^s + (1-f)\tau_c^s \quad (I-33)$$

$\tau_w^s$  et  $\tau_c^s$  sont les cisssions dans les parois et cellules et  $f$  la fraction volumique de parois. L'évolution de chacune de ces cisssions est reliée aux densités respectives de dislocations. Les évolutions de ces densités sont interconnectées, puisqu'un accroissement de densité dans les cellules provient de la formation de boucles par mécanisme d'*Orowan* au niveau des parois. Les résultats obtenus sont remarquables et permettent de décrire parfaitement les 4 stades de la déformation. Néanmoins, plusieurs remarques peuvent être formulées.

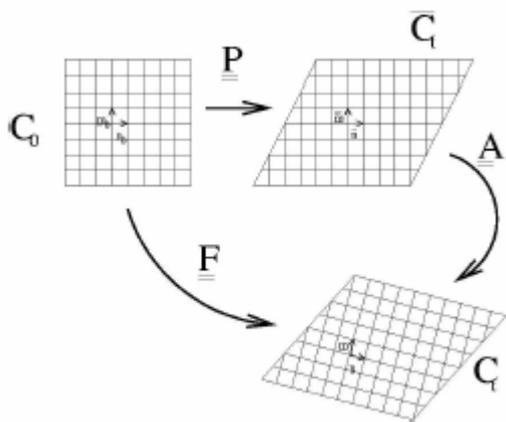


Figure I-29 : Principe de la décomposition  $\underline{F} = \underline{A}\underline{P}$  en grandes déformations du tenseur gradient  $\underline{F}$  en contributions élastique  $\underline{A}$  et plastique  $\underline{P}$ .

- Ce modèle est basé sur une double hypothèse de *Taylor*, la première effectuée au niveau des glissements dans les parois et cellules, supposés identiques, la deuxième pour le passage de l'échelle cristalline à l'échelle macroscopique. Ce faisant, il ne peut être utilisé pour estimer l'énergie stockée puisque les contraintes internes sont irréalistes.
- L'évolution de la fraction volumique de parois est supposée a priori, se basant sur des mesures de diffraction et doit être réadaptée suivant le chemin macroscopique de déformation. La valeur initiale choisie initialement semble très élevée puisque elle atteint 0.25 avant déformation, ce qui paraît irréaliste.

**Modèle de Lemoine** [LEM95] : Ce modèle suit les mêmes bases que le modèle précédent, quant à la notion de biphasage de la microstructure, de variables internes aux évolutions couplées (densités de dislocations), mais est introduit dans un schéma autocohérent de type *Kröner*. Cependant, il n'y a pas d'hypothèses fortes sur le glissement, si bien que les incompatibilités de déformation plastique se traduisent par la présence de contraintes internes entre parois et murs. Quant à l'évolution de la fraction volumique  $f$  de parois, elle dérive de la force motrice introduite à l'aide de l'énergie libre de la microstructure. De plus, ce modèle a été développé afin de tenir compte de l'évolution de texture et de microstructure, les cellules ayant une morphologie elliptique et une orientation cristallographique évolutive. Malheureusement, il nécessite l'identification de très nombreux paramètres dont l'effet a été inhibé par le schéma autocohérent, si bien que l'apport de cette démarche par rapport à celle introduisant une description de l'écrouissage de type *Tabourot et al.* (de formalisme plus simple) est difficilement perceptible. Enfin, il n'existe pas à notre connaissance dans la littérature, d'écrits relatant l'utilisation de ce modèle pour l'étude du stade IV.

### 3-3 Introduction d'effets d'échelle dans les mécanismes d'écrouissage

Un des défauts inhérents aux modélisations présentées précédemment concerne l'absence de longueur caractéristique explicite. Prenons l'exemple des codes aux éléments finis où ces lois sont intégrées. Pour une discrétisation de la structure identique, la réponse mécanique du calcul sera indépendante de la taille de maille choisie. Ainsi, l'effet de taille de grain sur le niveau de limite d'élasticité ne peut être correctement traduit dans des calculs éléments finis, avec ce type de modélisations. Afin de régler ce problème, sont apparues récemment des théories non locales faisant intervenir des notions de gradients de variables internes. Nous présenterons ici deux approches, les travaux de *Busso et al.* [BMO00] et ceux de *Acharya, Bassani, Beaudoin et al.* [AB99], [AB00], [KBT02], [BAC+00].

Dans ces deux approches, l'effet d'échelle est traduit dans l'écriture des lois d'écrouissage. Elles tiennent compte des densités de dislocations comme variables internes d'écrouissage. Dans la décomposition en grandes déformations  $\underline{F} = \underline{A}\underline{P}$  (figure I-29), les contributions  $\underline{A}$  et  $\underline{P}$  ne sont pas des gradients.

Ainsi, sur la configuration intermédiaire  $\overline{C}_t$ , *Acharya et al.* [AB00] définissent un vecteur de Burger cumulé  $\underline{b}$  de toutes les dislocations traversant une surface de glissement  $A$ , fermée, délimitée par un contour  $C$  et de normale  $\underline{n}^s$  dans la configuration intermédiaire comme

$$\underline{b} = \oint_C \underline{A}^{-1} d\underline{x} \quad (\text{I-34})$$

A l'aide du théorème de Stokes, il est possible d'introduire le tenseur d'incompatibilité de réseau  $\underline{\underline{\Lambda}}$

$$\oint_C \underline{\underline{A}}^{-1} d\underline{x} = \int_A \underline{\underline{\Lambda}} : \underline{\underline{n}}^s dA \quad (\text{I-35})$$

où  $\underline{\underline{n}}^s$  est l'unique tenseur antisymétrique défini par  $\underline{\underline{n}}^s \cdot \underline{a} = \frac{1}{2} \underline{\underline{n}}^s \wedge \underline{a}$  pour tout vecteur  $\underline{a}$  quelconque.

$\underline{\underline{\Lambda}}$  est défini par

$$\underline{\underline{\Lambda}} = (A_{j_i,k} - A_{k_i,j}) \underline{e}_i \otimes \underline{e}_j \otimes \underline{e}_k \quad (\text{I-36})$$

Ce tenseur fait intervenir une notion non locale, puisqu'il dépend du voisinage du point considéré.

Le scalaire  $\lambda^s$  peut alors être défini

$$\lambda^s = \sqrt{(\underline{\underline{A}} : \underline{\underline{n}}^s) (\underline{\underline{A}} : \underline{\underline{n}}^s)} \quad (\text{I-37})$$

$\lambda^s \neq 0$  dénote la présence de dislocations perçant le système (s). Ainsi  $\lambda^s/b$ , par exemple, peut être considéré comme une mesure de densité de dislocations provenant uniquement de la décomposition cinématique choisie et, qui peut être cumulée à la densité de dislocation statistiquement distribuée (équation I-35), sans pour autant en être indépendante.

$$\dot{\rho} = \sum_s \left\{ k_0 \frac{\lambda^s}{b} + k_1 \sqrt{\rho} - k_2 \rho \right\} |\dot{\gamma}^s| \quad (\text{I-38})$$

Ce modèle a donc été appliqué pour étudier l'effet de taille de grain sur la réponse mécanique macroscopique de polycristaux (figure I-31) ainsi que l'apparition du stade IV dans les aciers (figure I-31).

La théorie présentée précédemment est basée sur le calcul d'un vecteur de Burger cumulé, à partir de l'incompatibilité du tenseur  $\underline{\underline{A}}$ .

La théorie décrite ci-dessous est basée sur ce même calcul, mais à partir de l'incompatibilité du tenseur  $\underline{\underline{P}}$ . Ces deux approches sont en fait équivalentes [CG01].

L'approche de *Busso* [BMO00] consiste aussi à décomposer la cission critique d'écoulement  $S^s$ , l'une provenant de dislocations statistiquement distribuées  $S_s^s$ , l'autre provenant de dislocations géométriquement nécessaires  $S_G^s$ .

$$S^s = \sqrt{S_s^{s^2} + S_G^{s^2}} \quad (\text{I-39})$$

La fraction de la résistance au glissement provenant des dislocations statistiquement distribuées est donnée par la relation d'érouissage suivante :

$$S_s^s = \lambda_s \mu b_s^s \sqrt{\rho_s^s} \quad (\text{I-40})$$

De la même manière que dans l'approche de *Acharya et al.*, le vecteur de Burger cumulé, ici noté  $\underline{\underline{G}}$ , calculé sur la configuration intermédiaire, s'écrit :

$$\underline{\underline{G}} = -\oint_{\Gamma} \underline{\underline{P}} d\underline{Y} \quad (\text{I-41})$$

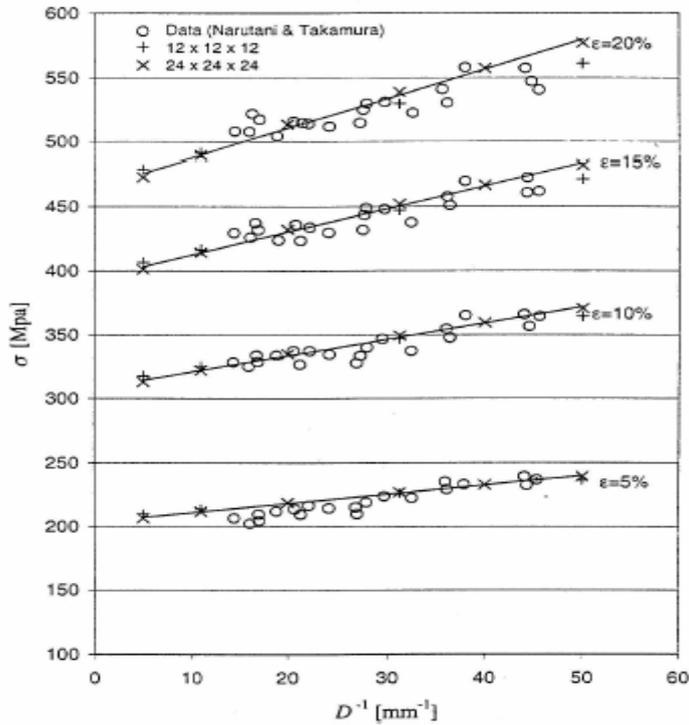


Figure I-30 : Effet de la taille de grain sur la réponse macroscopique mécanique d'un nickel à 77 K. La valeur du paramètre de maille élément fini, dans chaque cas, est modifiée pour tenir compte de la variation réelle de taille de grain. Sont comparées les simulations avec des valeurs expérimentales [AB00]

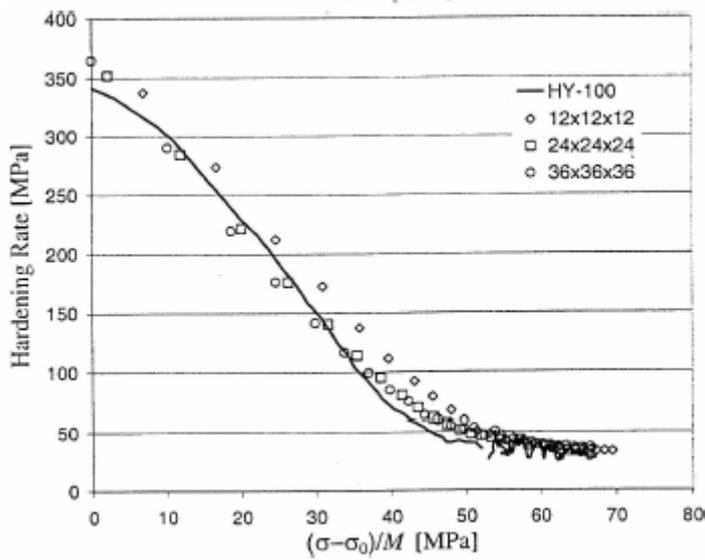


Figure I-31 : Evolution du taux d'écroutissage pour un acier martensitique HY-100 et comparaison avec le résultat de trois calculs éléments finis de discrétisations différentes. Le stade IV est parfaitement modélisé [AB00]

où  $\Gamma$  est un circuit fermant une surface  $S$  de normale  $\underline{r}$  et  $d\underline{Y}$  un vecteur défini sur la configuration initiale. Le théorème de *Stokes* permet une fois de plus de montrer que :

$$\underline{G} = \int_S \underline{\underline{\Lambda}} \underline{r} dS \quad (\text{I-42})$$

$\underline{\underline{\Lambda}}$  étant cette fois ci défini comme  $\underline{\underline{\Lambda}} = \underline{\underline{rot}}(\underline{P})$ , ce qui introduit aussi une notion non locale. En distribuant cette égalité sur tous les systèmes de glissement

$$\underline{\dot{G}} = \int_S \underline{\underline{\Lambda}} \underline{r} dS \quad (\text{I-43})$$

il vient

$$\underline{\dot{\underline{\Lambda}}} = \underline{\underline{rot}}((\dot{\gamma}^s \underline{m}^s \otimes \underline{n}^s) \underline{\dot{P}}) \quad (\text{I-44})$$

En définissant un vecteur densité de dislocations géométriquement nécessaires  $\underline{\rho}_G^s$  de vecteur de Burger  $\underline{b}_G^s$  dans un repère local  $(\underline{m}^s, \underline{n}^s, \underline{t}^s)$  à l'aide des densités respectives de vis (indice  $s$ ) et de coins (indice  $e$ ) suivant  $\underline{n}^s$  et  $\underline{t}^s$ ,  $\underline{\rho}_{GS}^s$ ,  $\underline{\rho}_{Gen}^s$  et  $\underline{\rho}_{Get}^s$ , l'évolution de ce vecteur densité est alors reliée au gradient de glissement, rendant ainsi ce modèle non local.

$$\underline{b}_G^s (\dot{\rho}_{GS}^s \underline{m}^s + \dot{\rho}_{Gen}^s \underline{t}^s + \dot{\rho}_{Get}^s) = \underline{\underline{rot}}(\dot{\rho}^s \underline{n}^s \underline{P}) \quad (\text{I-45})$$

La fraction de la cission critique de glissement provenant des dislocations géométriquement nécessaire  $S_G^s$  se décompose elle aussi en trois termes, dépendant des trois composantes du vecteur densité de dislocations  $\underline{\rho}_G^s$ , au travers d'expressions reliant la cission à la racine carrée de la densité, pondérée par une matrice d'interaction.

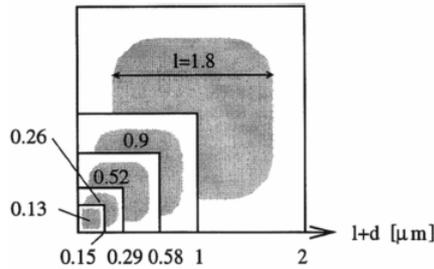


Figure I-32 : Tailles de précipités utilisées dans les calculs éléments finis de Busso et al. En assumant la même fraction volumique dans chaque cas.  $l$  est la taille du précipité et  $d$  l'espace inter-précipité [BMO00].

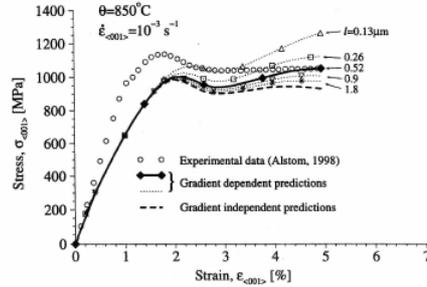


Figure I-33 : Effet de la taille de précipité sur la réponse mécanique d'un alliage base nickel à 850°C.

L'application de ce modèle a été effectuée sur des alliages biphasés base Nickel où la taille des précipités ainsi que la distance inter précipités modifient singulièrement le comportement (figures I-32 et I-33). Il n'est cependant pas à exclure que ce modèle puisse apporter, tout comme le modèle précédemment évoqué, une description de l'écrouissage en stade IV.

Il faut noter une distinction conceptuelle entre ces deux modèles [KBT02]. Dans la première approche, il n'est pas fait de distinction, dans l'évolution de la cission critique d'activation du glissement, entre dislocations statistiquement distribuées et géométriquement nécessaires. Il est considéré un second libre parcours moyen déterminé géométriquement, distinct de celui

déterminé par la densité de dislocations statistiquement distribuées. Dans la seconde approche, les évolutions des deux densités de dislocations sont indépendantes et contribuent explicitement à travers l'équation I-35 à l'augmentation de la contrainte d'écoulement.

### 3-4 Modélisation du comportement du polycristal par transition d'échelles

#### 3-4-1 Définition des échelles de travail

D'une manière simplifiée, il est possible de classer les modèles décrivant le comportement des matériaux en deux grandes classes. Les premiers, souvent dénommés modèles phénoménologiques, sont basés sur des variables internes définies à l'échelle de l'élément de volume de la mécanique des milieux continus [LC96], [HIL50]. Les concepts introduits pour caractériser le comportement suivent tout de même quelques principes propres à une variété de matériaux. Par exemple, le critère de von Mises est défini sur le déviateur des contraintes, considérant, pour les métaux, que la pression hydrostatique n'influe pas sur l'écoulement plastique. Ils présentent l'avantage de caractériser le comportement du matériau via un nombre limité de variables internes, si bien que leur introduction dans un logiciel aux éléments finis est facilitée. Cependant, l'identification des paramètres régissant l'évolution des variables internes nécessite une base expérimentale conséquente et, bien souvent, ce type de modèle retraduit difficilement le comportement de structures soumises à des trajets de chargements complexes.

La deuxième classe de modèles est constituée de modèles construits sur la base d'une approche micromécanique [ZAO90], [HIL65], [LEM95], [FAN01]. Ici, il est envisagé de construire le comportement du polycristal à partir de la connaissance du comportement à une échelle inférieure de ses constituants. Ces échelles doivent d'abord être définies. L'échelle macroscopique du comportement du polycristal est alors reliée à celle de la mécanique des milieux continus. A cette échelle est définie un Volume Élémentaire Représentatif (VER), sur lesquels les champs mécaniques appliqués sont homogènes. L'échelle de représentation du comportement, dite échelle microscopique, est par essence reliée à une notion d'hétérogénéité microstructurale. Cette hétérogénéité peut être représentée par la distribution de défauts (précipités, dislocations) à l'intérieur d'un grain. A une échelle supérieure, on peut considérer l'hétérogénéité microstructurale comme étant la distribution de familles de grains d'orientations cristallographiques différentes, dénommées phases par la suite, si bien que l'on considère alors les champs locaux microscopiques homogènes par phase. A l'heure actuelle, la description du comportement individuel d'une dislocation fait l'objet d'une théorie unifiée. De même, considérer un ensemble de dislocations à l'aide d'une variable interne simple, la densité de dislocations  $\rho$ , permet de caractériser complètement le comportement du monocristal. Mais le passage entre les deux échelles de représentation n'est pas encore effectué et fait l'objet actuellement de recherches poussées. Caractériser complètement la distribution dans une microstructure de défauts cristallins relève encore de la gageure, si bien que l'échelle de représentation la plus fiable pour la description micromécanique reste encore celle de la phase.

Reste alors à définir les étapes nécessaires pour construire l'approche micromécanique :

- la première, dénommée étape de localisation, a pour objet de relier les champs mécaniques homogènes à l'échelle du VER que sont les contrainte  $\underline{\underline{\Sigma}}$  et déformation  $\underline{\underline{E}}$  aux champs locaux à l'échelle microscopique.
- l'étape de représentation consiste à décrire le comportement à l'échelle microscopique choisie, c'est-à-dire de relier les tenseurs de déformation  $\underline{\underline{\varepsilon}}_g$  et de contrainte  $\underline{\underline{\sigma}}_g$ , l'indice  $g$  indiquant la phase considérée.

– la dernière étape, l'homogénéisation, consiste à moyenner les champs locaux pour dégager le comportement au niveau du VER

Schématiquement, cette démarche est résumée figure I-34.

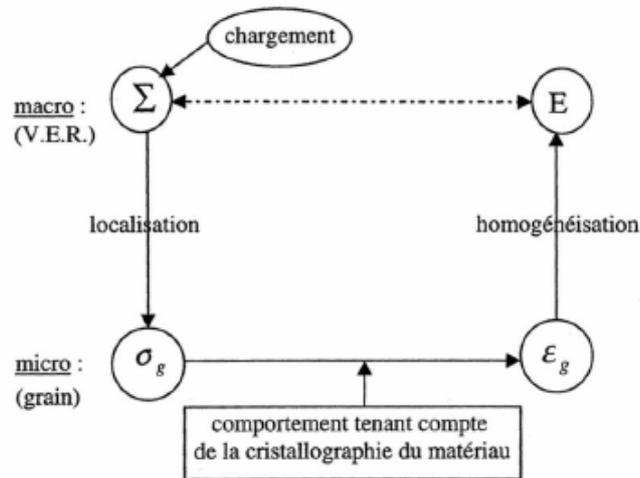


Figure I-34 : Schéma de principe de l'approche micromécanique.

### 3-4-2 Différents modèles de changement d'échelle

#### 3-4-2-1 Modèle de Taylor et dérivés

Modèle originel, le modèle de Taylor [TAY38] prévoit l'uniformité de la déformation plastique

$$\underline{\underline{E}}^p = \underline{\underline{\varepsilon}}_g^p \quad (\text{I-46})$$

Ce modèle est aussi fréquemment appelé modèle *Full Constraint* (FC). Par essence, il ne conçoit pas la présence de contraintes internes intergranulaires. Sa grande simplicité de mise en œuvre ainsi que sa capacité à prévoir qualitativement les textures en grande déformation continue à contribuer à lui assurer un certain succès. L'équation (I-42), associée à l'hypothèse d'isochorie de la déformation plastique  $E_{kk}^p = 0$ , conduit nécessairement à ce que 5 systèmes de glissement soient simultanément actifs. Dans le cadre de la plasticité pure sans viscosité, se pose le problème de l'indétermination des systèmes de glissement. Il est donc nécessaire de trouver l'ensemble des systèmes qui minimise le travail de déformation. Ceci signifie que, pour un cristal cubique centré présentant 24 systèmes de glissement équiprobables, il est nécessaire, pour accommoder la déformation, de choisir parmi  $C_{24}^5 = 42504$  combinaisons, d'où un traitement numérique long et fastidieux. Cependant, la plupart des observations expérimentales ont tendance à montrer que la déformation d'un grain se réalise en utilisant moins de 5 systèmes simultanément. D'autre part, l'équilibre des contraintes n'est pas assuré par ce modèle.

– Le modèle de *Lin-Taylor* [ZAO90] fait porter l'hypothèse cinématique d'homogénéité de la déformation, non plus sur la déformation plastique  $\underline{\underline{E}}^p$ , mais sur la déformation totale  $\underline{\underline{E}}$ .

Ce modèle fournit une borne supérieure des contraintes, mais contrairement au modèle de *Taylor*, il permet de calculer l'énergie stockée, par familles d'orientations, provenant du champ élastique des contraintes internes.

– Afin de diminuer le nombre de systèmes actifs et aussi dans le but d’adoucir les textures prévues par le modèle de *Taylor FC*, certains auteurs ont choisi de libérer des conditions cinématiques. Ces modèles sont appelés modèles de *Taylor* [AVL93] relâchés ou encore *relaxed constraints* (RC). Si 1, 2 et 3 (figure I-26) sont respectivement les directions de laminage, transverse et normale dans le cas du laminage, alors dans le cadre de la théorie dite ”lath”, la condition  $\underline{E}_{13}^p = \underline{\varepsilon}_{13}^p$  n’est plus respectée et dans la théorie dite ”pancake”, c’est la condition  $\underline{E}_{23}^p = \underline{\varepsilon}_{23}^p$  qui est relâchée. La théorie ”lath” est envisageable pour les grains qui, durant le laminage, gardent une largeur constante mais qui s’aplatissent et s’allongent.

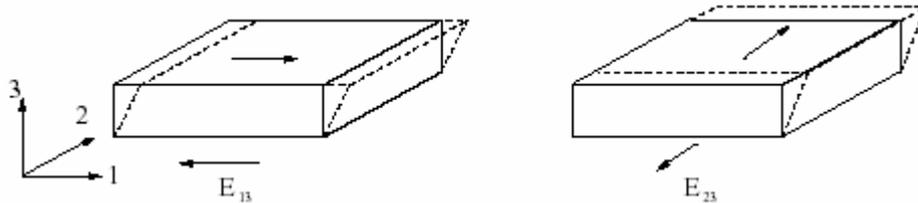


Figure I-35 : Modèle de Taylor relâchés dit ”lath” et ”pancake”.

- Modèle de Batdorf et Budianski [BB49] (cité par [ZAO90])

Ce modèle dit aussi modèle de contraintes uniformes ou modèle statique est basé sur l’hypothèse d’uniformité des contraintes (équation (I-47))

$$\underline{\underline{\sigma}}_g = \underline{\underline{\Sigma}} \quad (\text{I-47})$$

Conséquemment, la compatibilité des déformations entre phases n’est pas assurée. De part son caractère extrémal, il fournit une borne minimale pour la réponse en contrainte du polycristal. Ce modèle n’a été que très peu utilisé, contrairement au modèle de *Taylor*.

### 3-4-2-2 Modèles autocohérents

Dans l’approche autocohérente, chaque phase est introduite dans un Milieu Homogène Equivalent (MHE) et l’interaction avec ce milieu est estimée. Cette dernière nécessite la résolution du problème de l’inclusion d’*Eshelby* [FPZ93]. La moyenne des interactions sur toutes les phases donne l’interaction intergranulaire moyenne, permettant ainsi de déterminer le comportement du milieu homogénéisé. On voit ici que la résolution de ce problème est complexe, celui-ci étant de nature implicite.

Modèle de *Kröner* ([KRÖ61] cité par [ZAO90]) *Kröner* s’appuie sur la résolution du problème d’*Eshelby*, en considérant une inclusion déformée d’une quantité homogène  $\underline{\varepsilon}_g^p$  immergée dans une matrice soumise à une déformation plastique homogène  $\underline{E}^p$  et en résolvant ensuite le schéma autocohérent, il dérive la loi de localisation suivante :

$$\underline{\underline{\sigma}}_g = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta)(\underline{E}^p - \underline{\varepsilon}_g^p) \quad (\text{I-48})$$

$\mu$  est le module de cisaillement isotrope et  $\beta = \frac{2(4 - 5\nu)}{15(1 - \nu)}$ , ( $\nu$  est le coefficient de Poisson)

dérive directement de la résolution du problème d’*Eshelby* [FPZ93]. Cependant, dans cette approche, *Kröner* présuppose que les interactions mécaniques entre la matrice et l’inclusion sont

purement élastiques et ne prend pas en compte la plastification de la matrice. De plus,  $\beta$  étant proche de  $\frac{1}{2}$ , on peut montrer que ce modèle est presque aussi raide qu'un modèle de *Taylor*.

Modèle de *Berveiller et Zaoui* [BZ79]

Ce modèle s'appuie sur la résolution du problème autocohérent proposé par *Hill* [HIL65]. Où, cette fois ci, on considère le problème d'une inclusion élastoplastique plongée dans un milieu homogène équivalent élastoplastique, ceci dans le but de résoudre le problème de surévaluation des contraintes rencontré par *Kröner*. En considérant un comportement global isotrope, ainsi qu'un chargement monotone et radial, ces auteurs ont proposé la loi de localisation suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{\sigma}}_g = \underline{\underline{\Sigma}} + 2\mu(1 - \beta)\alpha(\underline{\underline{E}}^p - \underline{\underline{\varepsilon}}_g^p) \\ \frac{1}{\alpha} = 1 + \frac{3}{2}\mu \frac{\sqrt{\frac{2}{3}\underline{\underline{E}}^p : \underline{\underline{E}}^p}}{\sqrt{\frac{2}{3}\underline{\underline{\Sigma}} : \underline{\underline{\Sigma}}}} \end{array} \right. \quad (\text{I-49})$$

$\alpha$  décroît progressivement avec la déformation, si bien que la contrainte a tendance à s'homogénéiser dans le polycristal quand la déformation macroscopique augmente. De cette manière, ce modèle permet de mieux décrire l'hétérogénéité des déformations dans le polycristal.



## CHAPITRE II

### ELABORATION ET CARACTERISATION DES MATERIAUX

Ce chapitre présente les caractéristiques métallurgiques et mécaniques des deux microstructures (bainite et martensite) élaborées à partir de l'acier 16MND5, acier utilisé pour la fabrication par forgeage des aciers de cuve de réacteur à eau sous pression. Les deux microstructures ont donc la même composition chimique que le matériau d'origine, elles diffèrent par la taille des entités cristallographiques qui les constitue, ainsi que par la taille et la répartition des carbures.

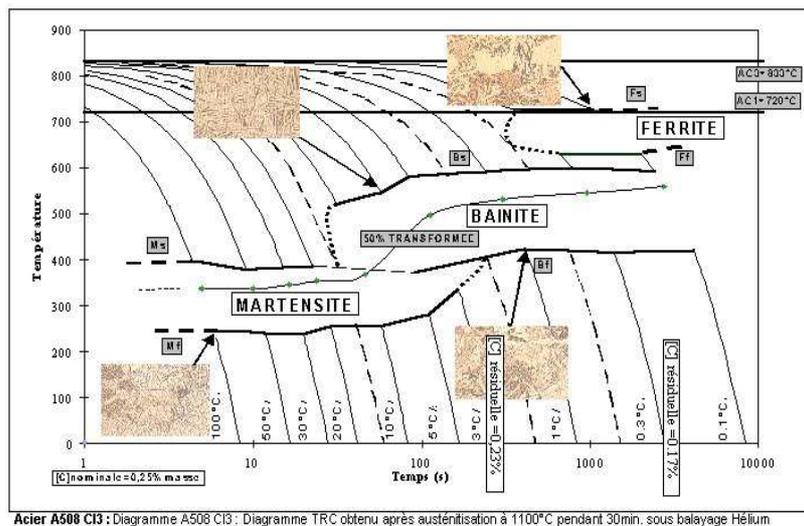
#### 1 Matériaux d'origine et élaboration des matériaux

Le matériau d'origine est un acier à bas carbone, dont la composition est donnée dans le tableau II-1. Il correspond à un morceau de tubulure de cuve de réacteur à eau sous pression (figure II-3). Les principaux éléments d'addition permettent d'améliorer la trempabilité et le taux de carbone est réduit afin de permettre une meilleure soudabilité.

C	Mn	Si	Cr	Ni	Mo	S	P	Cu	Al
0,25	1,29	0,23	<0,05	0,72	0,49	0,008	0,014	0,03	0,035

Tableau II-1 : Composition chimique du matériau en % massique

A température ambiante, l'acier 16MND5 est constitué d'un mélange de ferrite et de cémentite ( $Fe_3C$ ). Plusieurs transformations peuvent se produire en fonction de la vitesse de refroidissement (diagramme TRC figure II-1), dont la transformation bainitique et la transformation martensitique.



Acier A508 C13 : Diagramme A508 C13 : Diagramme TRC obtenu après austénitisation à 1100°C pendant 30min. sous balayage Hélium

Figure II-1 : Diagramme TRC du matériau d'approvisionnement.

L'obtention de la martensite s'effectue à partir d'une austénitisation à 1100°C suivie d'un refroidissement à une vitesse moyenne supérieure à 20°C/s. Pour la bainite, la vitesse doit être inférieure à 5°C/s. Ces vitesses de refroidissement, (figure II-2) ont été obtenues par une trempe à l'eau dans le cas de la martensite et d'une trempe à l'air pour la bainite.

Pour élaborer les deux matériaux, des barreaux de 22 x 20 mm<sup>2</sup> ont été prélevés dans le matériau d'approvisionnement. Les premiers essais de traitements thermiques ont été instrumentés pour vérifier les conditions de maintien et de descente en température.

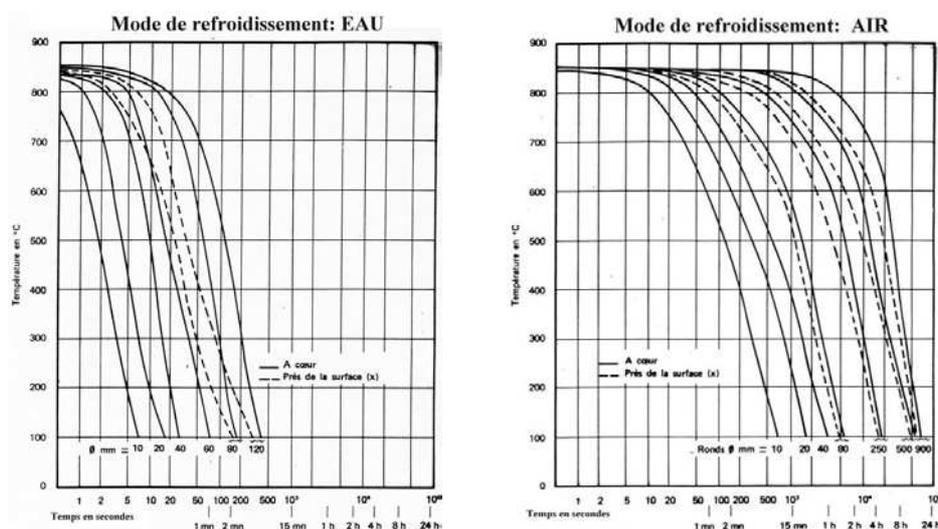


Figure II-2 : Diagrammes de refroidissement d'un acier A508 Cl 3.

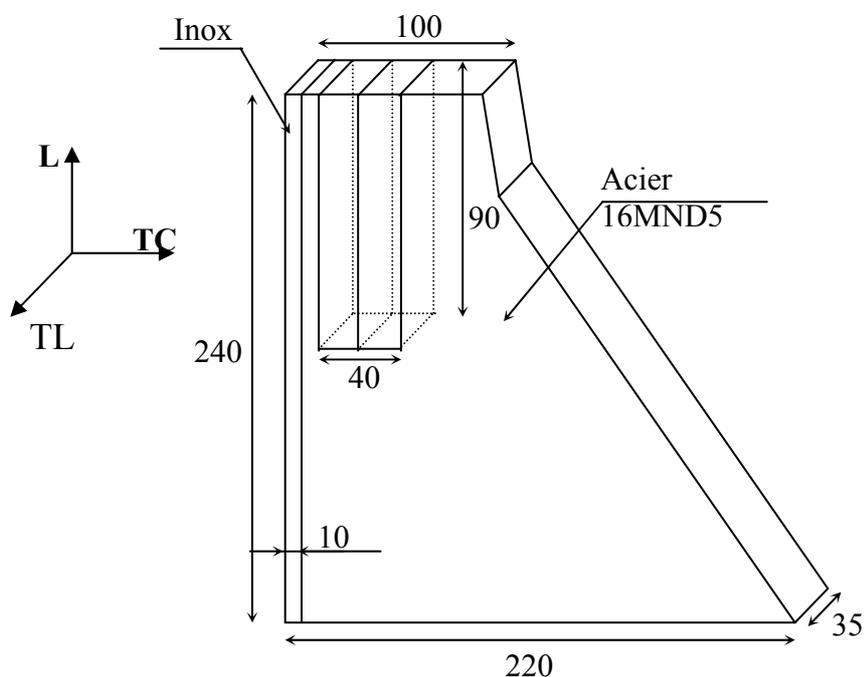


Figure II-3 : Schéma de la géométrie du matériau d'approvisionnement.

Les traitements thermiques subis par le matériau pour l'obtention des deux microstructures sont les suivants :

- Austénitisation à 1100°C pendant ½ heure,

- Trempe à l'eau pour la martensite,
- Trempe à l'air pour la bainite,
- Revenu à 630°C pendant deux heures pour les deux microstructures,
- Trempe à l'eau pour les deux microstructures.

## 2- Microstructures des matériaux élaborés

Les deux microstructures obtenues, présentent des morphologies différentes, la bainite présente une morphologie plutôt en paquets allongés d'épaisseur assez conséquente alors que la martensite présente une morphologie en lattes ou plus précisément en aiguilles de faible épaisseur mais avec des orientations bien préférentielles (figure II-4).

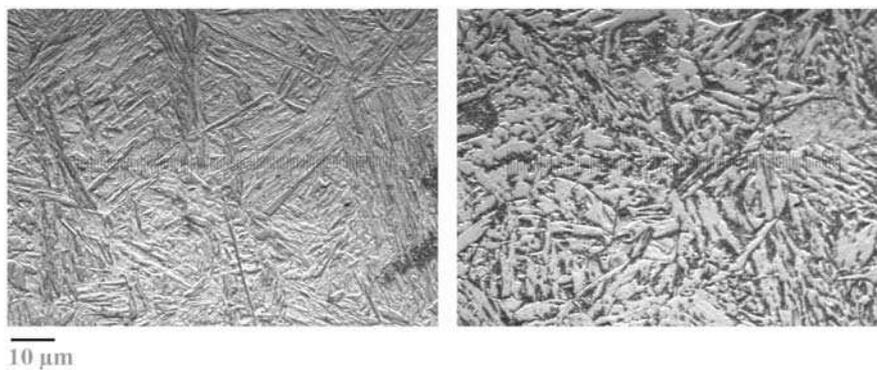


Figure II-4 : *Microstructures martensitique (gauche) et bainitique (droite).*

### 2-1 Structure bainitique revenue

La structure bainitique est constituée de plages de ferrite aciculaire (environ 50%) et d'îlots de bainite (figure II.5). La taille des anciens grains  $\gamma$  (difficile à mettre en évidence) est comprise entre 50 et 100  $\mu\text{m}$ .

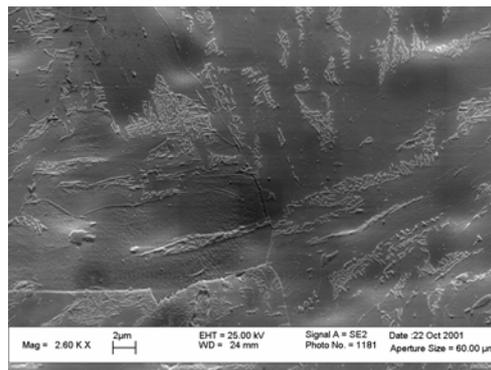


Figure II-5 : *Cliché MEB de l'état bainitique revenu*

Les analyses EBSD permettent de déterminer la taille des entités cristallographiques, définies comme des zones présentant une orientation moyenne préférentielle des axes macroscopiques par rapport aux axes cristallins. Pour réaliser les mesures, les échantillons reçoivent préalablement un polissage mécanique suivi d'un polissage électrolytique, avec un mélange *STRUERS A2*, à une tension de 55 Volts pendant 15 secondes.

Les axes macroscopiques utilisés dans toute l'étude, sont définis de la façon suivante :

ND est la normale à l'échantillon notée [001] sur les cartes EBSD et correspondant à la direction TC (travers court),

RD correspond à l'axe de traction, noté [010] et aussi à TL (travers long)

TD [100] correspond à l'axe L (long).

### Mise en évidence de la cémentite

L'analyse d'une plage de 50 $\mu\text{m}$  x 25 $\mu\text{m}$ , effectuée avec un pointé tous les 0.4 $\mu\text{m}$  (figure II-11), montre que :

- les carbures ne sont pas indexés.

Ils apparaissent sur les cartes d'orientations, comme des points ayant une couleur différente de celle de la matrice. Leurs positions dans la ferrite sont parfaitement localisées, comme le montre la comparaison de l'image MEB et de l'image EBSD (figure II-6).

- l'orientation des îlots de bainite est très proche de celle de la ferrite à l'intérieur d'un ancien grain  $\gamma$ .

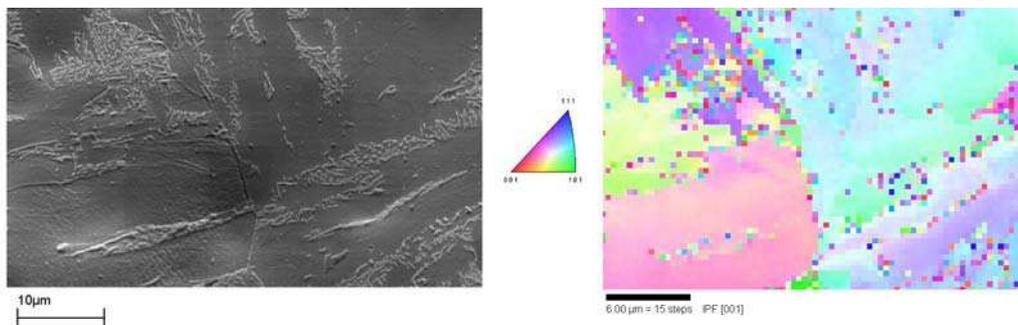
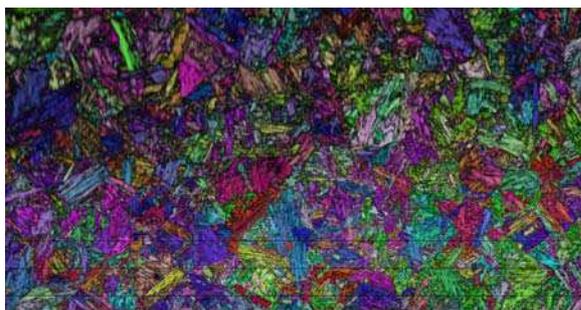


Figure II-6 : *Comparaison entre un cliché MEB et une analyse EBSD de l'état bainitique revenu.*

On note des dégradés de couleur qui correspondent à un faible gradient de désorientation.

### Cartes EBSD d'orientation

Les cartes des orientations des axes DN, DL et DT et de l'indice qualité, sont données figures II-7. La plage analysée est de 800 X 400  $\mu\text{m}^2$ . Les pointés sont effectués tous les micromètres. Ces conditions de mesure, ne permettent pas de révéler les carbures dont l'épaisseur est voisine de 100nm. Les zones sombres correspondent aux interfaces entre paquets de lattes qui ne sont pas indexées. On observe que les entités cristallines sont formées de paquets de lattes faiblement désorientés dont la taille est d'environ 10-20 $\mu\text{m}$



DL



DN

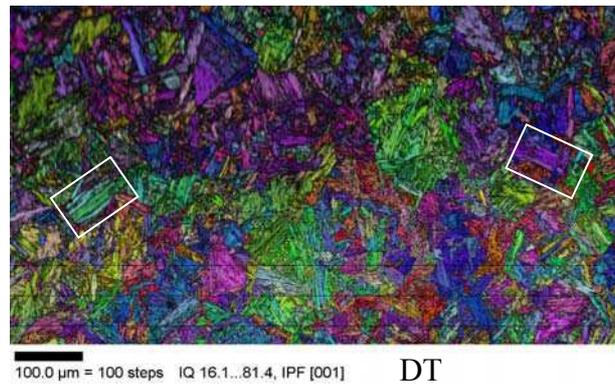


Figure II-7 : Cartes des orientations et de l'indice qualité des axes DN, DL et DT.

Dans la simulation, les cartes sont lissées, l'orientation qui a le meilleur indice qualité est attribuée à un paquet de lattes. La désorientation entre entités est fixée arbitrairement à 15 degrés. Un exemple est donné figure II-9.

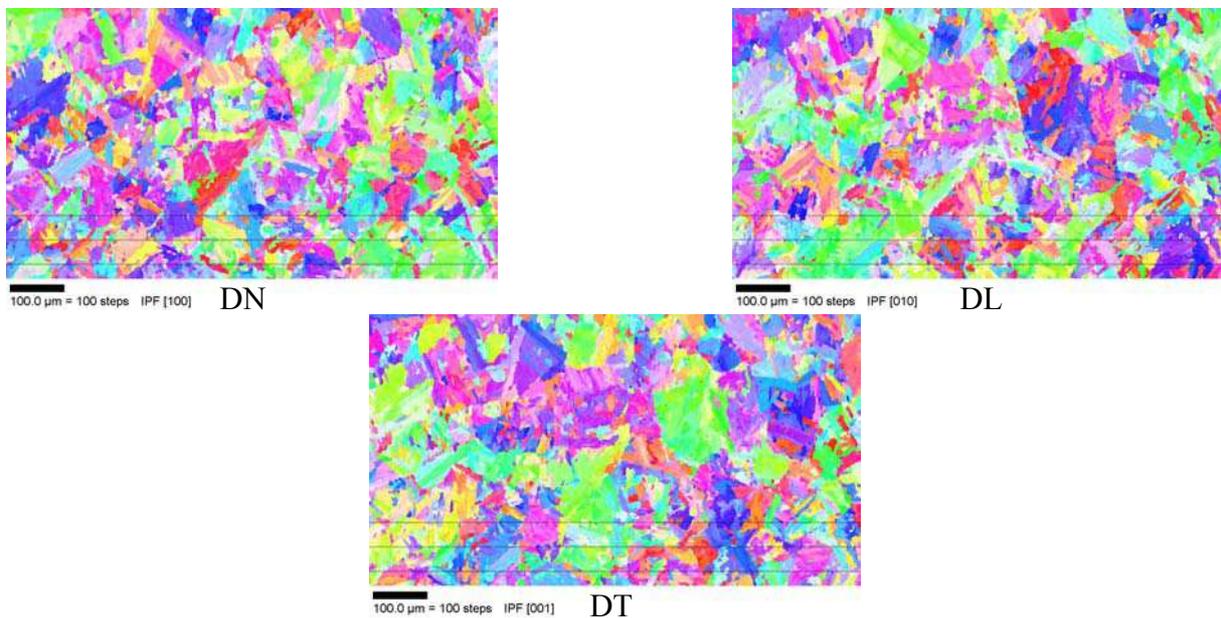


Figure II-9 : Cartes des orientations des axes DN, DL et DT utilisées pour les simulations.

On remarque qu'il est difficile de déterminer à partir des trois figures, la position des ex-grains austénitiques.

Un autre exemple correspondant à la carte d'une plage 400μm x 400μm, obtenue avec un pointé tous les 1μm est donné figure II-10. Les entités cristallines apparaissent plus clairement avec une carte des grains.

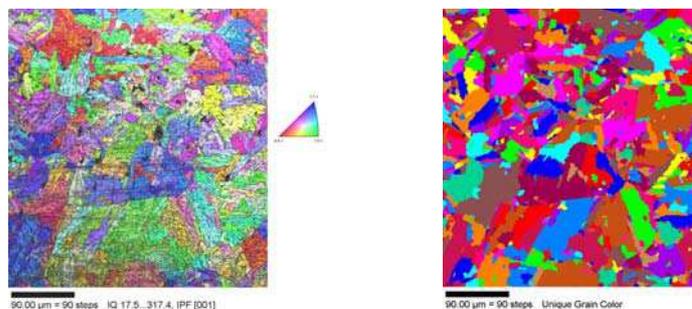


Figure II-10 : Analyse EBSD de la bainite revenue et la carte « unique grain color » correspondante

### Distribution des désorientations

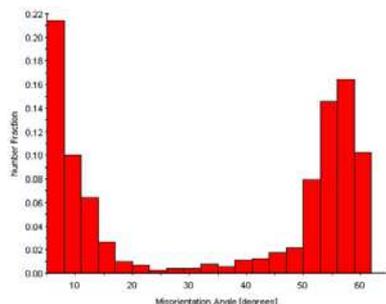


Figure II-11 : *Distribution des désorientations entre grains voisins dans la bainite.*

L'analyse des désorientations entre grains voisins montre une répartition bimodale de celle-ci. On observe soit des sous-joints dont la désorientation est inférieure à 20 degrés, soit des joints de grains dont la désorientation est comprise entre 50 et 60 degrés.

### Texture globale et locale

Les figures de pôle obtenues par DRX (SRMA/CEA Saclay) sont données figure II-12. Les niveaux ne dépassent pas 1.36, ce qui correspond à une faible texture.

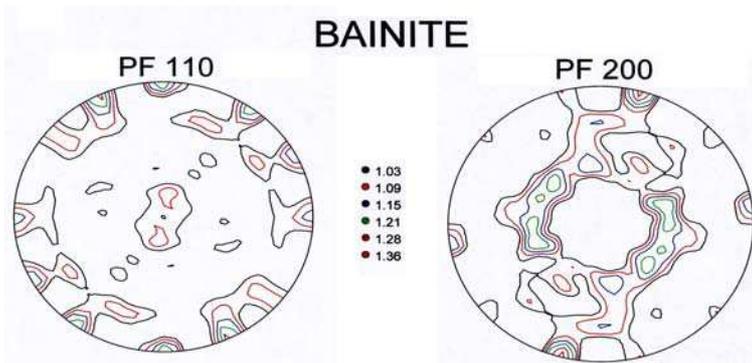


Figure II-12 : *Figures de pôle pour la bainite.*

Si la technique EBSD donne accès à la texture locale et à la morphologie, elle ne permet qu'une étude de surface.

Afin de tester la représentativité des agrégats, les textures locales de quelques zones étudiées sont comparées avec les résultats de la DRX.

### Exemple correspondant à la figure II-7 :

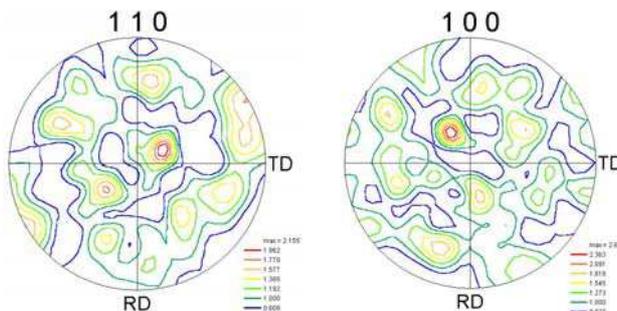


Figure II-13 : *Figures de pôle obtenues pour une surface de bainite de  $800 \times 400 \mu\text{m}^2$ .*

Les niveaux maximum sont de 2.15 pour la figure de pole (110) et 2.6 pour la figure de pole (100). Les niveaux sont faibles mais légèrement plus élevés que les résultats de la DRX. Seules les figures (110) sont comparables. La seule conclusion raisonnable est que le matériau n'est pas texturé. Il est difficile de s'appuyer seulement sur la technique EBSD qui ne permet qu'une analyse en surface de conclure à la représentativité des agrégats choisis.

## 2-2 Structure martensitique revenue

La microstructure (figure II-14) est caractéristique d'une martensite massive ( $M_S > T_{\text{ambiante}}$ ) présentant des paquets de lattes d'épaisseur inférieure à 1- 2 $\mu\text{m}$ . Les dimensions de l'ancien grain  $\gamma$  sont difficiles à estimer et du même ordre que celles de la bainite (50 à 100  $\mu\text{m}$ ).

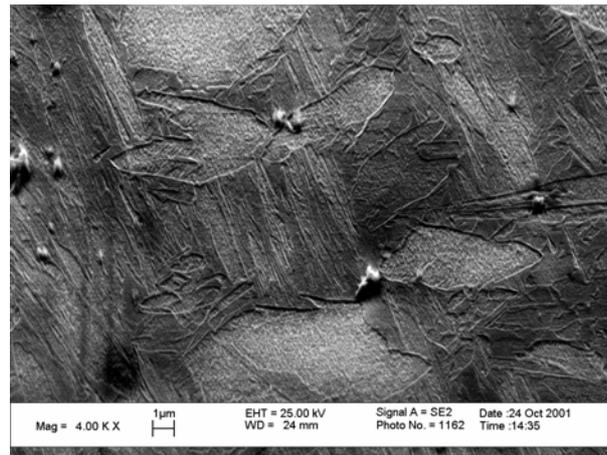


Figure II-14 : Cliché MEB de l'état martensitique revenu

La microstructure de la martensite étant plus fine que celle de la bainite, les pointés EBSD utilisés pour l'analyse sont de 0.5 $\mu\text{m}$  et les plages examinées sont plus réduites.

Les cartes d'orientation et d'indice qualité montrent une structure fine en aiguilles.

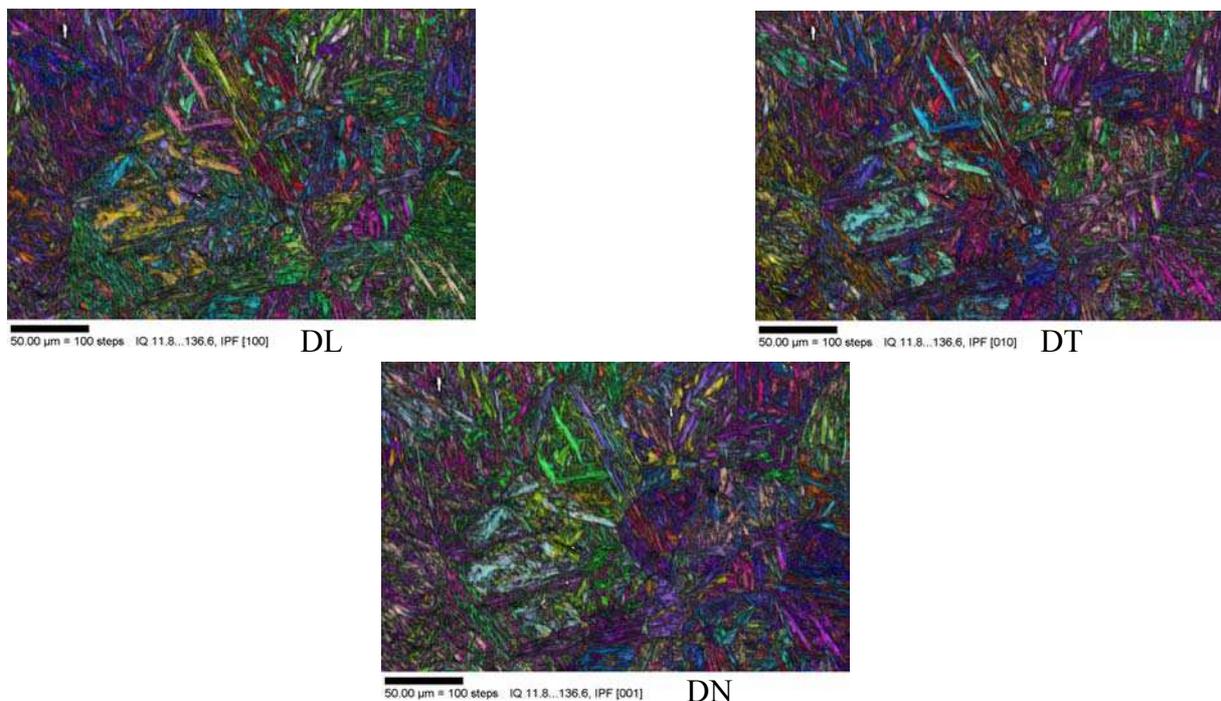


Figure II-15 : Carte d'orientation des axes DL, DT et DN et d'indice qualité

Les zones présentant un mauvais indice qualité correspondent aux interfaces entre lattes (figure II-15).

Les orientations de l'agrégat déduites de la carte EBSD sont simplifiées, comme le montre la figure II-16.

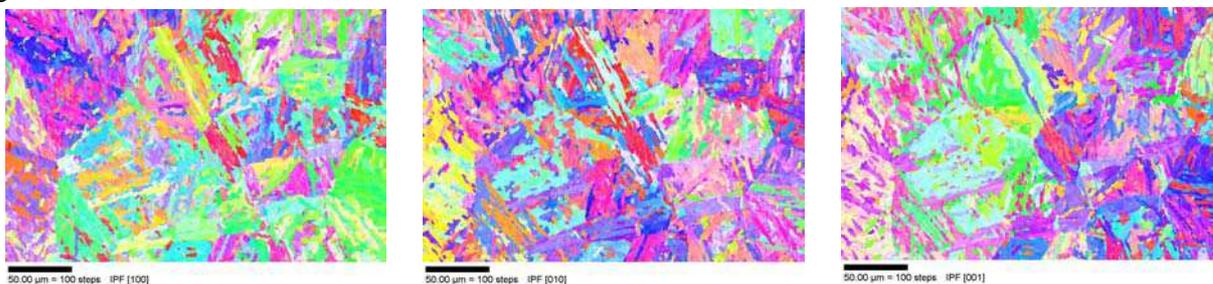


Figure II-16 : Cartes d'orientation pour les simulations.

Une deuxième plage (normale à TC) de dimension  $200 \times 200 \mu\text{m}^2$  correspondant à un autre échantillon est analysée figure II-18, avec un pas de  $0.5 \mu\text{m}$ . On observe des paquets de lattes enchevêtrés

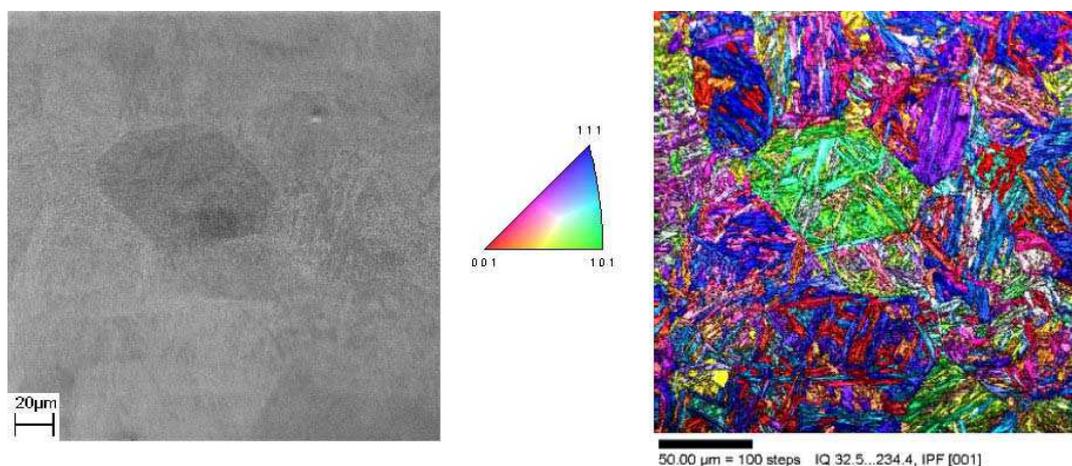


Figure II-18 : Martensite revenue : image MEB et image qualité obtenue par Analyse EBSD.

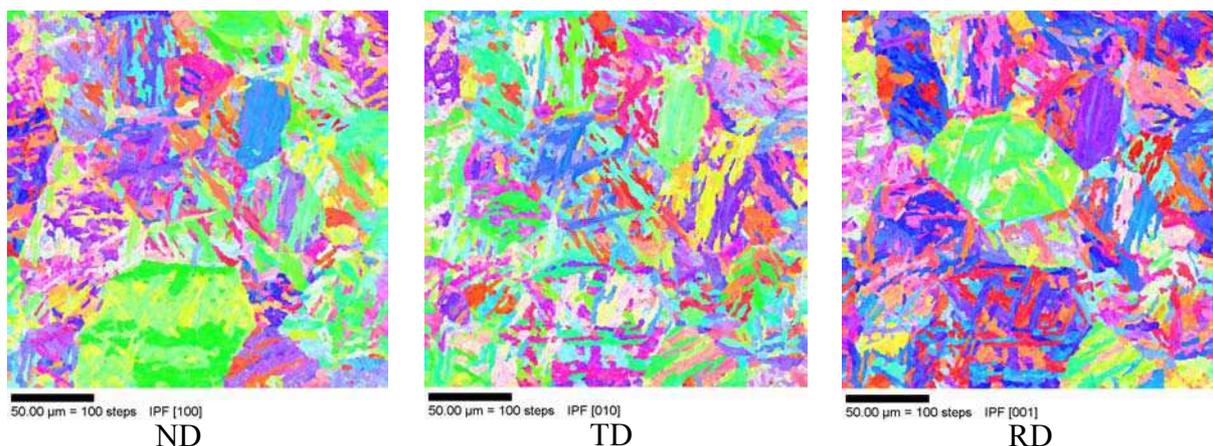


Figure II-19 : Martensite revenue: orientations cristallines.

Pour obtenir une meilleure résolution, une surface de  $10 \times 10 \mu\text{m}^2$  a été analysée avec un pas de  $0,1 \mu\text{m}$ . Les cartes d'orientation mettent en évidence une alternance d'orientation entre des paquets de lattes de  $2 \mu\text{m}$ . L'épaisseur des lattes serait inférieure à  $1 \mu\text{m}$  (figure II-20). Les zones non indexées se situent entre les paquets de lattes et au voisinage des anciens grains austénitiques.

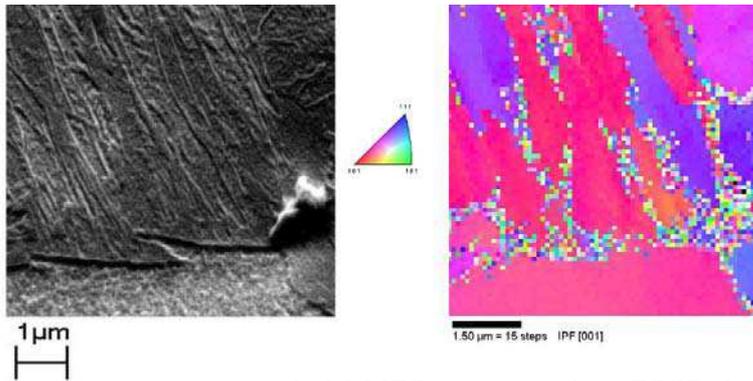


Figure II-20 : Comparaison entre un cliché MEB et une analyse EBSD de l'état martensitique revenu

Distribution des désorientations

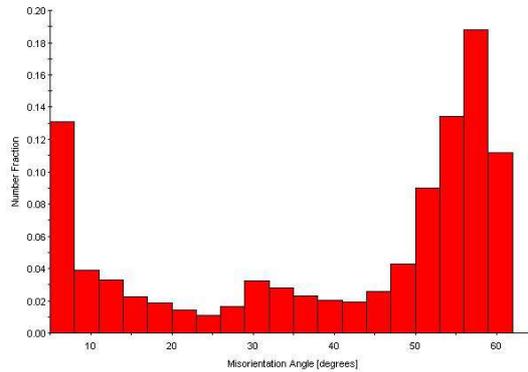


Figure II-21 : Distribution des désorientations entre grains voisins dans la martensite.

L'analyse des désorientations entre grains voisins montre que majoritairement les grains sont désorientés les uns par rapport aux autres de  $60^\circ$  avec néanmoins, une distribution moins nette que celle observée sur la bainite.

Texture globale et texture locale

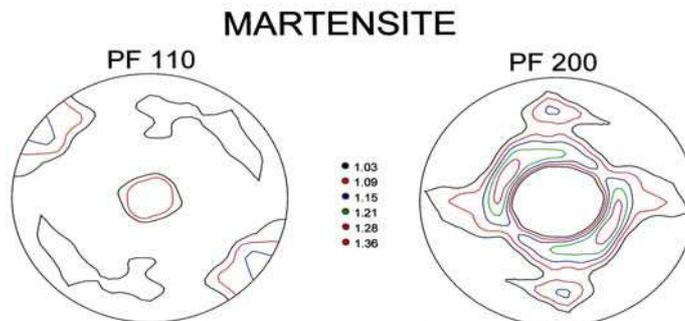


Figure II-22 : Texture obtenue par DRX (SRMA/CEA Saclay).

Les maxima sont de 1.36, on peut conclure que le matériau n'est pas texturé.

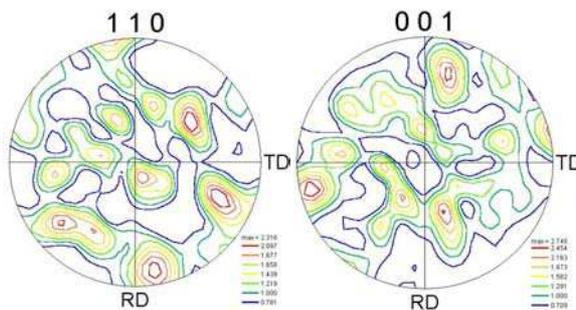


Figure II-23 : Textures réalisées sur les plaques utilisées pour les simulations.

Les textures présentées figure II-23 sont difficilement comparables aux textures par DRX, les faibles maxima montrent également que le matériau est peu texturé.

### 3- Microstructures de dislocations

#### 3-1 Bainite

Les micrographies (figure II-24) montrent des paquets de lattes peu désorientées, l'épaisseur des lattes est d'environ  $1\mu\text{m}$ . Il y a peu de carbures dans les lattes, la cémentite est localisée aux interfaces entre paquets de lattes.

Les dislocations sont formées de segments droits et mixtes. La densité de dislocations mesurée avant déformation est de  $0,7 \cdot 10^{14} \pm 0,3 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ . Après une elongation de 9%, la densité est de  $1,3 \cdot 10^{14} \pm 0,9 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ .

Notons que l'étude de K. Obrtlík et al, sur de la bainite déformée en traction simple à  $-196^\circ\text{C}$  montre une très forte hétérogénéité des densités de dislocations dans les grains, ce qui n'apparaît pas ici, faute d'une étude statistique.

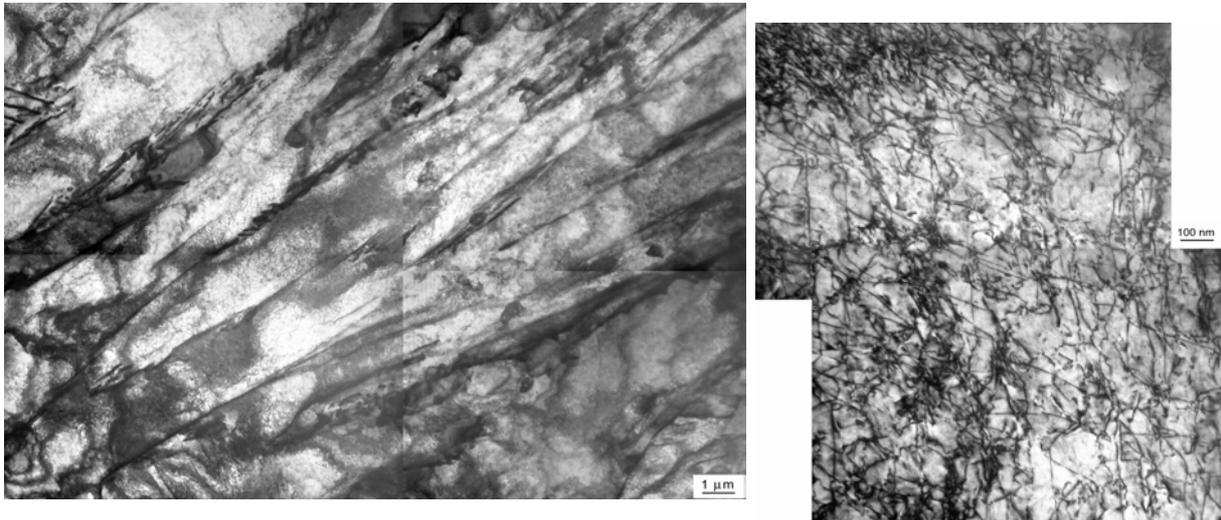


Figure II-24 : *Microstructure de la bainite revenue  $e=0\%$  (M. Karlík, Prague).*

A 9% la microstructure semble s'ordonner (figure II.25).

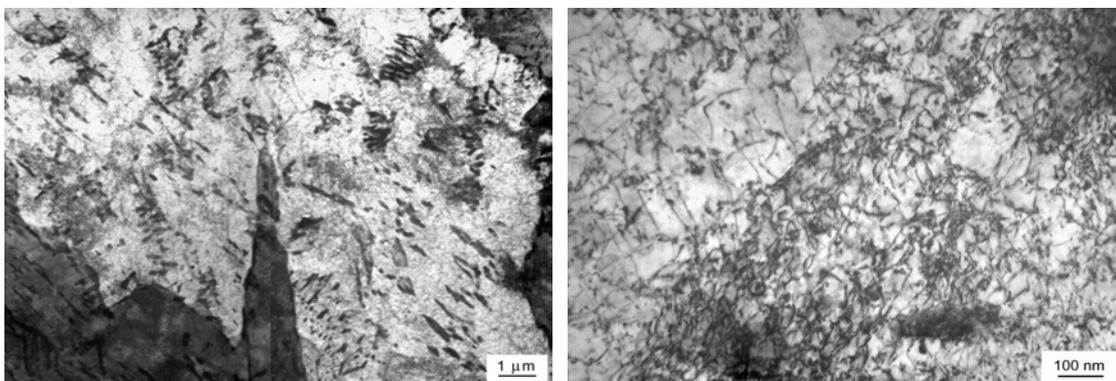


Figure II-25 : *Microstructure de la bainite revenue  $e=9\%$  (M. Karlík)*

### 3-2 Martensite

Les micrographies (figures II-26 et II-27) montrent des lattes de martensite de largeur inférieure à 100nm regroupées en paquets de 1 à 2µm. Les carbures sont repartis dans les lattes et ont un effet durcissant.

La densité de dislocations mesurée avant déformation est de  $1.8 \cdot 10^{14} \pm 1.2 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ . Pour une elongation de 8% la densité est de  $3.6 \cdot 10^{14} \pm 1.1 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ . La microstructure est formée de segments de dislocations droits et de dislocations mixtes (figure II-29).

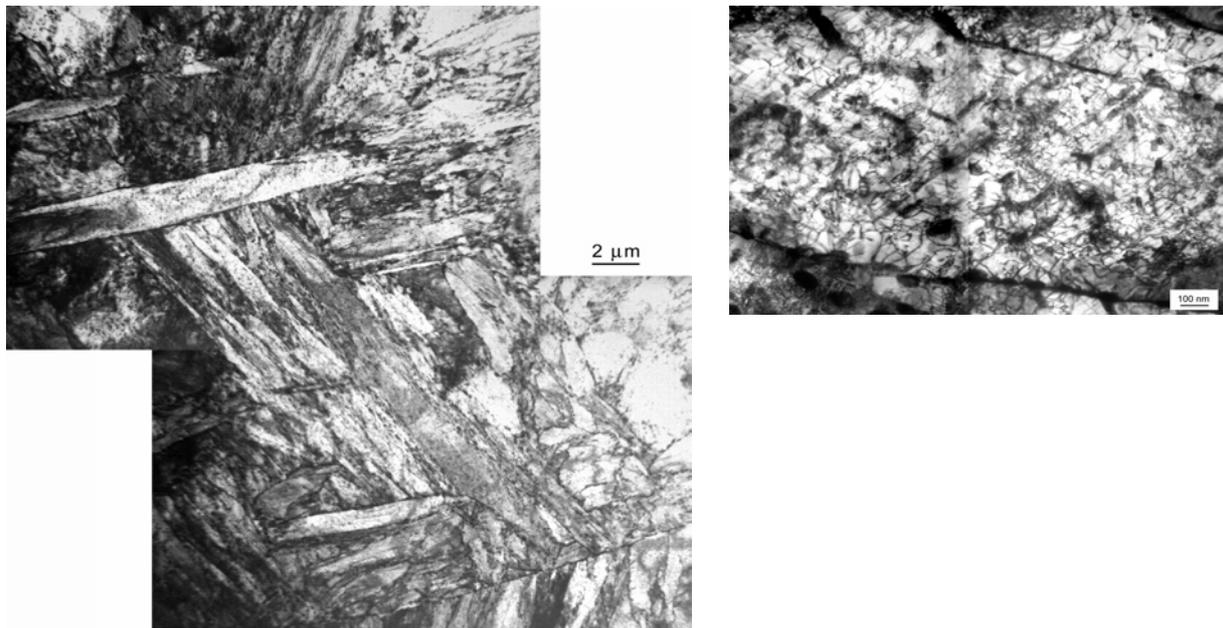


Figure II-26 : Microstructure de la martensite revenue, état non déformé (M. Karlik).

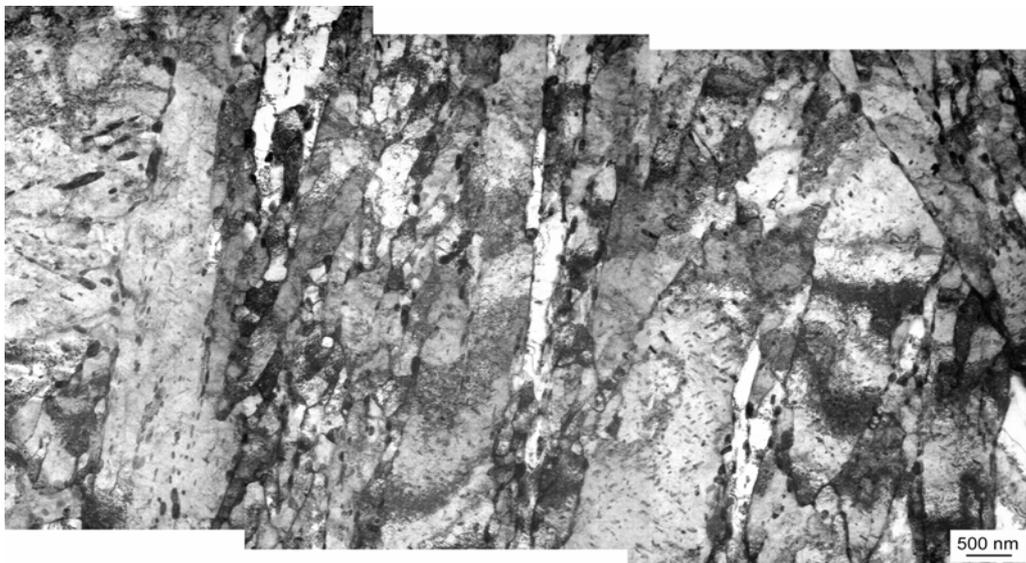


Figure II-27 : Microstructure de la martensite revenue, état non déformé (M. Karlik).



Figure II-28 : Microstructure de la martensite revenue déformée de  $e=9\%$ .

#### 4. Comportement mécanique des matériaux

##### Mesures de dureté et courbes de traction

Des mesures de dureté ont été faites sur les deux microstructures avec un microduremètre *VICKERS*. Les résultats sont donnés dans le tableau II-2. En ce qui concerne l'état bainitique, la différence de dureté entre l'état revenu et l'état non-revenu n'est pas très importante, la diminution est de 20HV (260 à 240 HV), tandis que pour l'état martensitique, la différence entre les deux états est de 200HV (500 à 300 HV).

Des essais de traction sur éprouvettes plates ont été effectués sur les deux microstructures. Le schéma des éprouvettes et l'orientation par rapport aux axes de la pièce d'approvisionnement, sont donnés sur la figure II-29.

La machine d'essai est une machine *INSTRON* électromécanique, à traverse mobile, avec des mors non auto-serrants. L'allongement est donné par un extensomètre fixé sur l'éprouvette.

La vitesse de traverse est de  $4 \cdot 10^{-5} \text{ m s}^{-1}$ , ce qui correspond à une vitesse de déformation moyenne de  $10^{-3} \text{ s}^{-1}$ .

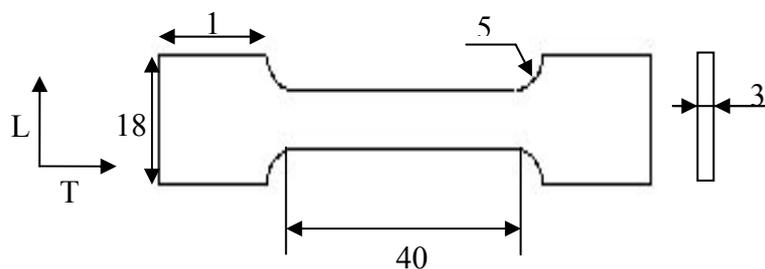


Figure II-29 : Géométrie des éprouvettes de traction.

Les courbes de traction (contrainte nominale en fonction de  $e = \Delta l / l_0$ ) sont données sur la figure II-30.

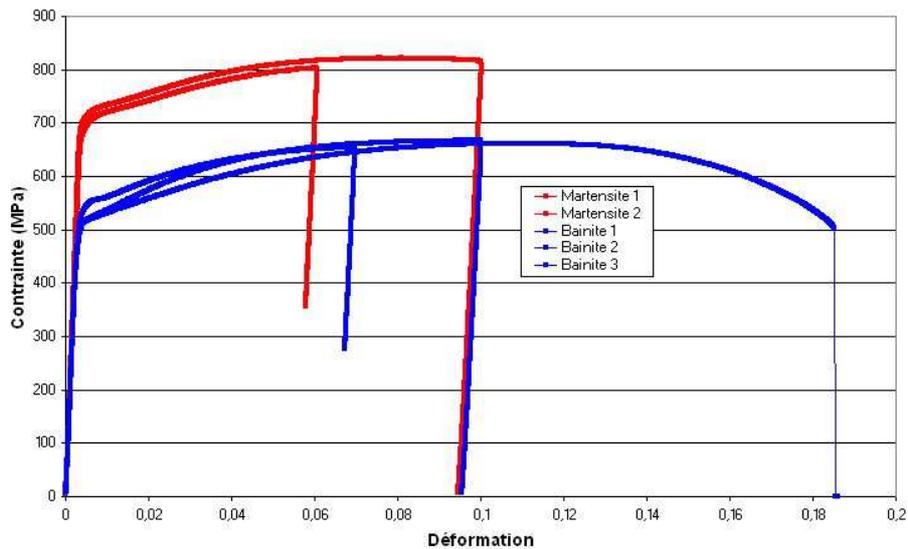


Figure II-30 : *Courbe de traction des deux microstructures*

On constate que les essais sont reproductibles à  $\pm 15$  MPa.

Les propriétés mécaniques des deux microstructures sont répertoriées dans le tableau II-2.

	Structure bainitique	Structure martensitique
Dureté avant déformation	230-240HV	270-290 HV
Limite d'élasticité	560-570 MPa	700-730 MPa
Pente d'écrouissage (jusqu'à 5%)	1.9-2.0 GPa	2.0-2.1 GPa
Contrainte à la striction	660-700 MPa	
Déformation à la striction	15-16 %	

Tableau II-2 : *Propriétés mécaniques des deux microstructures.*

### Résumé

*Deux microstructures correspondant à de la bainite et à de la martensite revenues ont été élaborées à partir du matériau d'approvisionnement 16MND5.*

*Les propriétés mécaniques et les microstructures sont classiques de ces matériaux. Des agrégats ont été constitués à partir des analyses EBSD avec une microstructure simplifiée. Les gradients d'orientation de lattes n'ont pas été pris en compte, lorsque la désorientation est inférieure à 5 degrés.*

*Les études par MEB et EBSD montrent que les entités cristallographiques sont beaucoup (4 à 5 fois) plus fines dans la martensite que dans la bainite.*



# CHAPITRE III

## ANALYSES EXPERIMENTALES ET NUMERIQUES DE DEUX AGREGATS DE BAINITE ET DE MARTENSITE REVENUES, SOLLICITES EN TRACTION SIMPLE

### 1 INTRODUCTION

L'objectif de ce chapitre est d'analyser et de comparer le comportement des deux microstructures bainitique et martensitique, déformées en traction simple à température ambiante, en s'appuyant d'une part, sur la détermination expérimentale des champs mécaniques en surface et l'observation des lignes de glissement et, d'autre part, sur la simulation numérique des champs mécaniques. Cette comparaison doit permettre de tester la validité de la modélisation et de proposer des améliorations. Les conclusions conduiront à une étude paramétrique qui fera l'objet du Chapitre IV.

La démarche expérimentale est la même pour les deux microstructures. Les essais de traction sont effectués à la température ambiante, sur des éprouvettes plates, dans une micro-machine de traction placée dans un MEB FEG LEO. Les éprouvettes de traction ont été découpées dans les matériaux élaborés au chapitre II. La vitesse de traction est de  $10^{-3} \text{s}^{-1}$ .

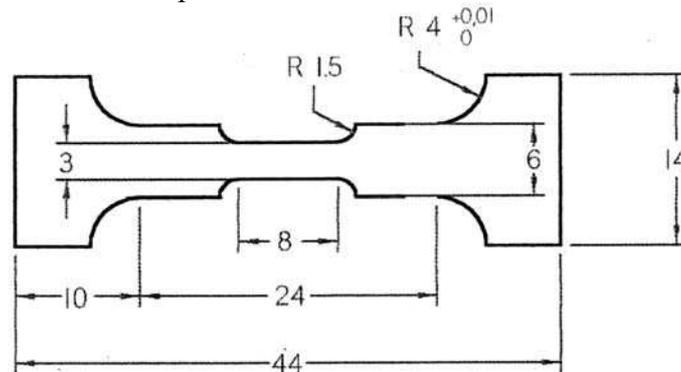


Figure III-1 : Schéma des éprouvettes de traction.

Sur chaque éprouvette, quatre zones de  $500 \times 500 \mu\text{m}^2$  ont été préalablement analysées par la technique EBSD. Le choix du pas de mesure EBSD a été dicté par la microstructure.

Pour la bainite le pas de mesure est de  $1 \mu\text{m}$

Pour la martensite le pas de mesure est de  $0.5 \mu\text{m}$

Des microgrilles (LMS Ecole polytechnique) de surface  $500 \times 500 \mu\text{m}^2$ , de  $2 \mu\text{m}$  de pas et dont les barreaux font  $0,4 \mu\text{m}$  d'épaisseur, sont déposées sur ou près des zones préalablement orientées.

Dans le cas de la bainite, on dispose donc, de l'orientation et de microgrilles permettant la mesure des trois composantes E11, E22 et E12 du tenseur de Green-Lagrange. Dans le cas de la martensite, les grilles ne recouvrent pas les zones orientées et de toute façon masquent la microstructure. Les mesures de déformation n'ont donc pas été possibles dans ce cas.

Deux taux d'élongation ont été analysés :  $e=4,5\%$  et  $e=9\%$ .

## 2 SIMULATION NUMERIQUE

La simulation des champs mécaniques locaux dans des agrégats de bainite et de martensite, repose sur le modèle cristallin développé au sein du laboratoire MSSMat et implémenté dans le code éléments finis ABAQUS. Ce modèle est développé dans le cadre des transformations finies et peut décrire les mécanismes de plasticité attachés au stade I, II et III des métaux purs (voir chapitre IV).

Les agrégats simulés correspondent à des plages d'orientation déterminées par EBSD, extraites des éprouvettes étudiées expérimentalement. Le problème essentiel est la représentativité des agrégats, sachant que la surface étudiée correspond à 4-5 ex-grains austénitiques. Les temps de calcul nous ont conduit à simuler une seule couche de grains. Les agrégats sont de taille suffisante pour mettre en évidence les phénomènes importants, mais ne sont pas forcément représentatifs.

### 2-1 Le modèle cristallin

Le modèle de plasticité cristalline utilisé ici [DRR00], [HRR00], prend en compte la déformation sous forme de glissement plastique sur les systèmes de glissement et la rotation du réseau cristallin. Il est implémenté dans le code élément finis ABAQUS. L'implémentation des lois de comportement en tant que "User Material Subroutine" a été décrite par Smelser et Becker [SB89]. Le cadre du modèle est celui développé par Asaro [PAN83] et amélioré par la suite par Teodosiu [TRT91].

La cinétique des transformations finies est basée sur une décomposition multiplicative du gradient de la transformation en une partie élastique et une partie plastique. Le tenseur vitesse de la transformation  $\tilde{L}$  est la somme des contributions élastique  $\tilde{L}^e$  et plastique  $\tilde{L}^p$  due au glissement plastique. Si  $\tilde{m}^s$  et  $\tilde{n}^s$  sont respectivement la direction de glissement et la normale du système (s) dans le grain (g), on a:

$$\tilde{L} = \tilde{D} + \tilde{W} = \tilde{L}^e + \sum_s \dot{\gamma}^s \tilde{m}^s \otimes \tilde{n}^s \quad (1)$$

où  $\tilde{D}$  et  $\tilde{W}$  sont respectivement, les parties symétrique et antisymétrique du tenseur  $\tilde{L}$ , et  $\dot{\gamma}^s$  la vitesse de glissement sur le système (s).

Les lois de comportement relient les comportements élastique et plastique par :

$$\tilde{\tau}^J = \tilde{K} : \tilde{D} - \sum_s \dot{\gamma}^s \tilde{R}^s \quad (2)$$

$\tilde{\tau}^J$  est la dérivée de Jaumann du tenseur de Kirchhoff  $\tilde{\tau}$  définie par

$$\tilde{\tau}^J = \dot{\tilde{\tau}} - \tilde{W}\tilde{\tau} + \tilde{\tau}\tilde{W} \quad (3)$$

$$\tilde{R}^s = \tilde{K} : \tilde{D}^s + \tilde{W}^s \tilde{\tau} - \tilde{\tau} \tilde{W}^s \quad (4)$$

$\tilde{K}$  est le tenseur des modules élastiques qui dans le cadre des petites déformations élastiques se confond avec le tenseur des modules élastiques habituel.

Dans les matériaux à structure cubique centrée, le mécanisme de déformation plastique le plus important est le glissement cristallographique sur les 24 systèmes  $\{110\} \langle 111 \rangle$  et  $\{112\}$

$\langle 111 \rangle$ . La condition d'activation d'un système de glissement (s) pour une orientation correspondant à une entité cristallographique, est donnée par:

$$|\dot{\tau}^s| \geq \dot{\tau}_c^s \quad (5)$$

où  $\tau^s$  est la cission résolue sur le système (s), donnée par :

$$\tau^s = \bar{\sigma} : (\bar{m}^s \otimes \bar{n}^s) \quad (6)$$

Où  $\bar{m}^s$  et  $\bar{n}^s$  sont respectivement la direction de glissement et la normale au système(s) dans le grain (g).

$\tau_c^s$  est la cission critique qui dépend des paramètres structuraux et de la température.

La loi d'écoulement dépend du mouvement des dislocations et la relation entre la cission appliquée  $\tau^s$  et la vitesse de déformation  $\dot{\gamma}^s$  peut être décrite par une loi puissance:

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^s}{\tau_c^s} \right|^n \text{sgn}(\tau^s) \text{ si } |\dot{\tau}^s| \geq \dot{\tau}_c^s \quad (7)$$

$$\dot{\gamma}^s = 0 \text{ sinon}$$

Où  $\dot{\gamma}_0$  est une vitesse de référence.

Cette loi dérive du calcul de la vitesse de déformation pour une dislocation qui se déplace dans une forêt de dislocations. L'écroutissage dépend essentiellement de l'interaction entre les dislocations mobiles et les dislocations du type forêt. L'évolution de la cission critique qui traduit l'évolution de la structure est donnée par:

$$\dot{\tau}_c^s = \sum_u h^{su} |\dot{\gamma}^u| \quad (8)$$

Où les composantes  $h^{su}$  de la matrice d'écroutissage traduisent l'interaction de la famille (s) avec toutes les dislocations (u), qu'elles soient encore en activité ou latentes, mais qui ont produit un glissement de vitesse de déformation  $\dot{\gamma}^u$ .

La cission critique réduite peut être exprimée en fonction de la densité de dislocation :

$$\tau_c^s = \tau_0 + \alpha \sqrt{\sum_u a^{su} \rho^u} \quad (9)$$

Où  $a^{su}$  est une matrice qui caractérise les interactions élastiques entre deux familles de dislocations (s) et (u). C'est une matrice 24 \* 24, étant donné qu'il y a 24 systèmes de glissements. Selon *Franciosi* [FRA83], la matrice d'interaction est constituée de 6 termes différents correspondant aux interactions entre des systèmes de glissements identiques, colinéaires et non colinéaires. Ces composantes sont données dans le tableau II-1 :

Plans	$\{110\} \cap \{110\}$	$\{110\} \cap \{112\}$	$\{112\} \cap \{112\}$
Identiques	$a_o$		$K_{so} a_o$
Colinéaires	$K_1 a_o$	$K_{p1} a_o$	$K_{so} K_1 a_o$
Non colinéaires	$K_1 K_2 a_o$	$K_{p1} K_{p2} a_o$	$K_{so} K_1 K_2 a_o$

Tableau II-1 : Coefficients de la matrice d'interaction.

La matrice d'interaction est supposée symétrique et constante avec la déformation.

La loi d'évolution des densités de dislocations est basée sur la relation d'*Orowan* et sur celle du processus d'annihilation des dipôles de dislocations [10]. L'évolution de la densité de dislocations est donnée par:

$$\dot{\rho}^s = \frac{1}{b} \left[ \frac{1}{L^s} - G_c \rho^s \right] |\dot{\gamma}^u| \quad (10)$$

$b$  est la norme du vecteur de Burgers

$G_c$  est le paramètre lié au processus d'annihilation entre dipôles de dislocations.

$L^s$  est le libre parcours moyen du système ( $s$ ) qui peut se mettre sous la forme:

$$L^s = \frac{K}{\sqrt{\sum_{u \neq s} \rho^u}} \quad (11)$$

où  $\rho^u$  est la densité de dislocations totale sur les systèmes latents ( $u$ ) et  $K$  un paramètre matériau.

En différentiant l'équation (9) par rapport au temps, et en prenant en compte la loi (10), on obtient la forme de la matrice d'érouissage:

$$h^{su} = \frac{\infty}{2} a^{su} \left( \sum_p a^{sp} \rho^p \right)^{-1/2} \left( \frac{1}{K} \left( \sum_{p \neq u} \rho^p \right)^{1/2} - G_c \rho^u \right) \quad (12)$$

La matrice  $h^{su}$  n'est plus symétrique lorsque la déformation augmente, elle décrit l'évolution de l'anisotropie liée à l'activation des systèmes de glissement pendant un trajet de déformation donné et, de ce fait, peut rendre compte des changements de trajets intragranulaires pendant un trajet macroscopique monotone.

Les dislocations prises en compte dans le modèle sont des dislocations continues et non discrètes, elles ne peuvent pas décrire une microstructure de dislocations (cellules, parois...). La microstructure continue est cependant approchée par la longueur d'échelle  $L^s$  qui évolue avec la déformation et qui traduit une distance moyenne entre les obstacles du type parois.

## 2-2 Identification des lois de comportement

Les paramètres sont identifiés par une méthode inverse sur la base de plusieurs essais mécaniques différents.

Les paramètres connus sont les constantes élastiques et le vecteur de Burgers. Les paramètres à identifier sont :

- La cission initiale  $\tau_0$  (MPa)
- La densité de dislocations initiale :  $\rho_0$  (mm<sup>-2</sup>)
- Le paramètre de création de dislocations  $K$  (sans dimension) qui dépend du matériau et qui est en général de l'ordre de 10.
- Le paramètre lié à la distance d'annihilation des dislocations  $G_c$  (nm).

- Les coefficients de la matrice d'écroissage qui correspondent aux interactions élastiques entre dislocations.
- Le coefficient de sensibilité à la vitesse qui doit être de l'ordre de 100.

Certains paramètres, comme le paramètre  $\dot{\gamma}_0$ , sont fixés pour des raisons numériques. Ici,  $\dot{\gamma}_0 = 10^{-11} \text{ s}^{-1}$ .

L'identification des paramètres « matériau » de la bainite et de la martensite est faite à partir des courbes de traction et de la texture des agrégats à l'aide du logiciel *SIDOLO*. Pour cette étude, deux méthodes d'identification ont été utilisées. La première repose sur un maillage grossier de l'éprouvette constitué de 25 éléments, dotés d'autant d'orientations tirées au hasard parmi celles mesurées par EBSD. Dans ce cas, *SIDOLO* est couplé au code EF *ABAQUS*. Le logiciel d'identification extrait du code EF la courbe de contraintes-déformations simulée, la compare à celle obtenue expérimentalement et ajuste les paramètres pour les réinjecter dans le code EF. Une nouvelle simulation est effectuée et ainsi de suite jusqu'à obtenir un jeu optimal de paramètres qui minimise l'écart entre la courbe expérimentale et la courbe simulée.

La seconde méthode utilise, en méthode inverse, le modèle auto-cohérent de *Berveiller-Zaoui* avec 500 orientations. Les deux identifications donnent des résultats équivalents.

**Méthode** : l'identification a été réalisée à l'aide du logiciel *SIDOLO* développé par *Ph. Pilvin*. Ce logiciel permet d'identifier les paramètres en comparant les résultats des essais avec ceux de la simulation en se basant sur la règle des moindres carrés et en ajustant au mieux ces paramètres pour minimiser l'écart entre les courbes de traction expérimentales et simulées. Cet écart est estimé comme suit :

$$L(A) = \sum_{n=1}^N L_n(A)$$

$$L_n(A) = \frac{1}{t_1 - t_0} \int_{t_0}^{t_1} (Z(a) - Z^*) D_n(Z(a) - Z^*) dt$$

avec :

N nombre d'essais de la base de données,

$Z(A) - Z^*$  écart entre les variables expérimentales et les variables simulées,

$D_n$  matrice de pondération.

Les valeurs des paramètres obtenus sont données dans le tableau suivant :

	<b>Bainite</b>	<b>Martensite</b>	<b>Ferrite (Ph. Eribeau)</b>
E (GPa)	200	200	210
n	0.29	0.29	0.29
b (nm)	0.257	0.257	0.257
n	100	100	100
K	8	13	41
$\tau_0$ (MPa)	150	265	20
Gc (nm)	8.4	6.5	8
$a_{ss}$	0.215	0.245	0.25
$\rho_0$ (m <sup>-2</sup> )	$1.5 \cdot 10^{12}$	$0.6 \cdot 10^{12}$	$0.015 \cdot 10^{12}$

*Remarque 1* : les densités de dislocations obtenues par identification étant plus fortes dans la bainite que dans la martensite, nous avons utilisé les résultats du chapitre II :

$$\text{Bainite, } \rho_0 = 0.7 \cdot 10^{14} \pm 0.3 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$$

$$\text{Martensite, } \rho_0 = 1.8 \cdot 10^{14} \pm 1.2 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$$

Ces valeurs ont été injectées dans le modèle utilisé lors de l'identification. Les problèmes de divergence n'ont pas permis d'obtenir de solution. Nous avons donc conservé les valeurs, identifiées, plus en accord avec des matériaux revenus.

*Remarque 2* : Dans les matériaux purs, les différents paramètres entrant dans les lois sont déterminés à partir d'essais sur monocristaux et sont souvent disponibles dans la littérature. Dans le cas des matériaux qui nous intéressent ici, ces paramètres sont déterminés par une méthode inverse, à partir du comportement macroscopique des polycristaux. On peut donc s'interroger d'une part, sur la signification des paramètres obtenus dans des polycristaux de taille de grains faible, où les joints de grains influencent fortement le comportement et d'autre part, sur la prise en compte des interactions entre les dislocations et le carbone et les précipités. La valeur  $\tau_0$  identifiée prend en compte dans cette étude, les interactions avec les éléments d'addition et les précipités.

*Remarque 3* : Compte tenu des approximations et hypothèses faites, nous nous sommes limités à une matrice d'interaction dislocation-dislocation composée des termes diagonaux et des termes non diagonaux, pris dans un rapport de 1,2. L'identification est donc critiquable, mais il n'existe pas actuellement, d'autres méthodes.

## 2-3 Maillages - Conditions aux limites- Représentation des joints de grains

### 2-3-1 Maillage de la structure

Afin d'intégrer directement les mesures EBSD dans la simulation, le maillage « éléments finis » est constitué d'éléments 3D cubiques à intégration linéaire réduite.

Pour la bainite, la taille des éléments est de  $1\mu\text{m}$  de côté, c'est à dire d'une Unité Arbitraire (UA). L'épaisseur du maillage correspond donc à une couche de 1 UA pour des entités cristallines dont la taille moyenne varie de 10 à 40 UA. Pour la martensite, la taille de l'élément est de  $0.5\mu\text{m}$  pour des paquets de latte inférieure à  $5\mu\text{m}$ . Dans les deux cas, la couche de grains est constituée de grains prismatiques.

Dans chaque élément du maillage, sont introduits la loi de comportement, l'orientation du grain, la densité de dislocations initiale et les paramètres physiques identifiés.

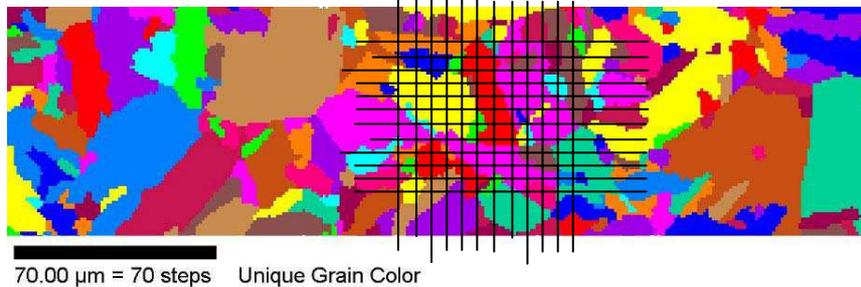


Figure III-2: Exemple de maillage d'un agrégat.

### 2-3-2 Représentation des joints de grains

Un joint de grains est d'une manière générale défini par cinq paramètres, l'angle de désorientation entre les grains, la position de l'axe de rotation (3 paramètres) et la position du plan du joint (2 paramètres).

Dans cette étude, la désorientation, l'axe de rotation et la trace du plan du joint sont connus. Compte tenu du maillage choisi, un joint de grains est défini comme le montre la figure suivante :

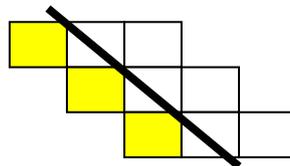


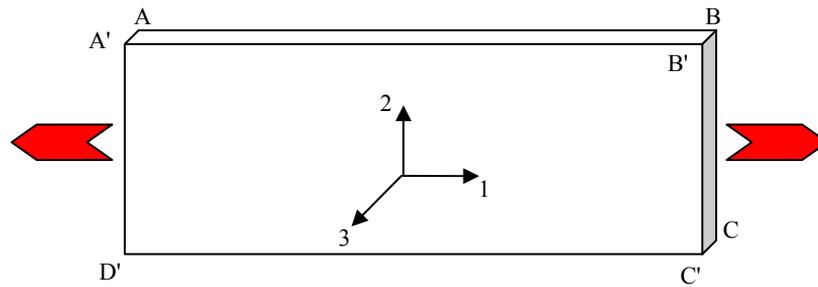
Figure III-3 : Représentation d'un joint de grains.

On suppose que le plan du joint est perpendiculaire à la surface étudiée. Cette hypothèse modifie les conditions de compatibilité de la déformation. L'état de contrainte obtenu doit être considéré comme une valeur moyenne. Il a été vérifié tout au cours de cette étude que la forme du joint n'induit pas de contraintes supplémentaires.

La seule possibilité d'obtenir l'orientation des interfaces est d'élaborer un agrégat 3D par une succession de polissages et de mesures d'orientation. Cette méthode est difficile à mettre en œuvre pour les matériaux étudiés ici.

Les ségrégations d'éléments aux joints de grains, pendant les traitements thermiques peuvent être à l'origine de gradients de propriétés à leur voisinage. Nous avons supposé que les gradients liés aux ségrégations étaient, dans une première approche, négligeables. La prise en compte de gradient de propriétés est tout à fait possible dans la simulation. Il est connu que la ségrégation de certains éléments s'effectue préférentiellement dans les joints de faible énergie comme les anciens grains austénitiques. Ce phénomène doit être pris en compte dans le critère d'endommagement et non pas sur la description du joint qui est, dans tous les cas, une zone dont l'épaisseur ne dépasse pas quelques distances atomiques.

### 2-3-3 Conditions aux limites



La direction 1 correspond à l'axe de traction.

La direction 3 est normale à la couche de grains analysée.

On impose :

- un déplacement dans la direction 1, aux points de BB'CC' et AA'DD'
- un déplacement nul dans la direction 2, aux 4 points milieu de AD, A'D', BC et B'C'
- un déplacement nul dans la direction 3, aux points de la face A'B'C'D'.

## 3- ETUDE EXPERIMENTALE ET NUMERIQUE DE LA BAINITE REVENUE

### 3-1 Etude expérimentale de la bainite revenue

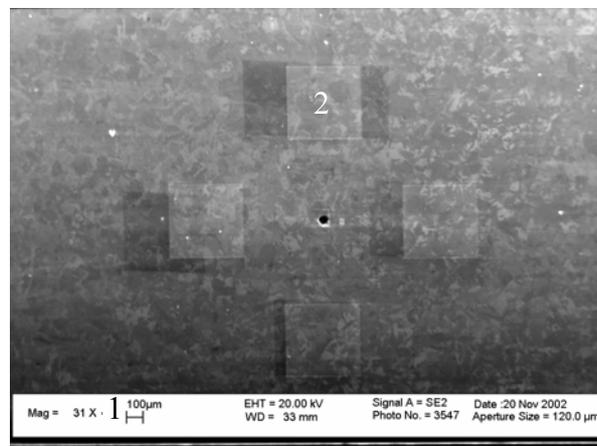


Figure III-4 : Position des 4 grilles sur une éprouvette de bainite.

La zone centrale de l'éprouvette de bainite est présentée sur la figure III-4. La grille analysée est la grille n°2. Les cartes EBSD des orientations des axes macroscopiques DL, DT et DN dans le repère microscopique sont données sur la figure III-5.

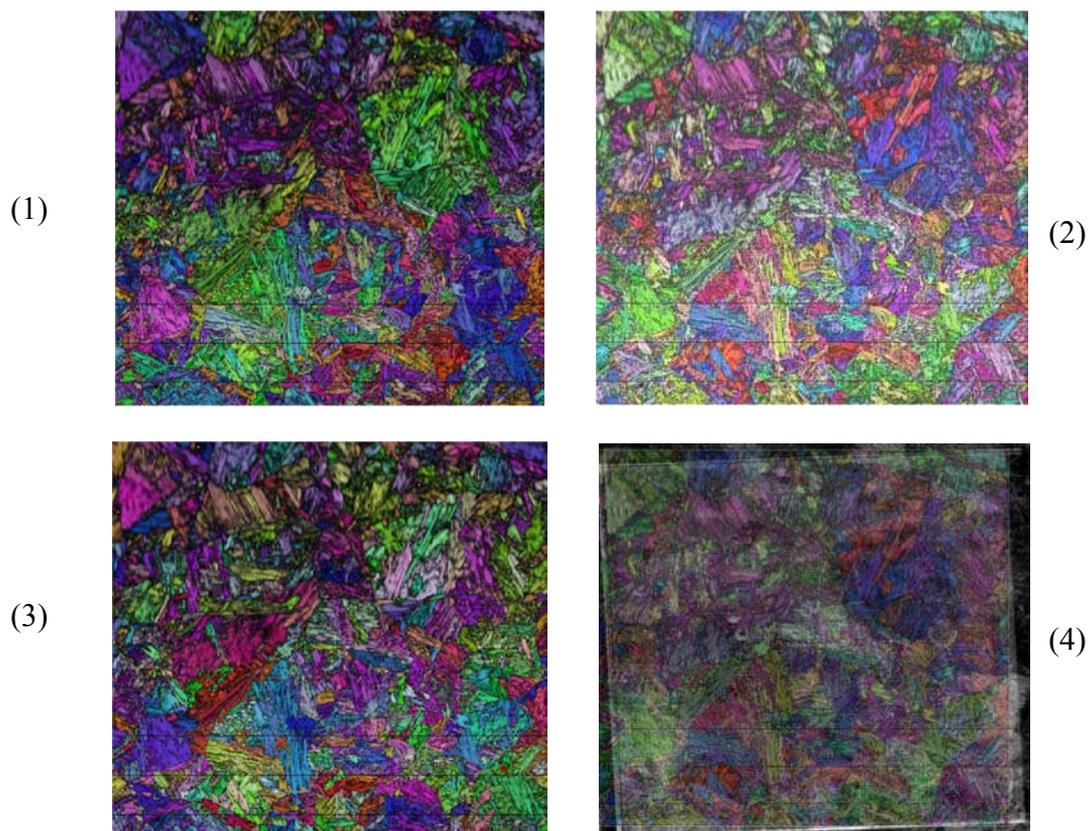


Figure III-5 : Bainite revenue Grille n°2, texture locale (DL (1), DT (2), DN (3)) et position de la grille (4).

Les ex-grains gamma sont détectables en superposant les 3 cartes des orientations. Afin d'éviter toute erreur, nous nommerons entités cristallographiques, les régions d'orientation monocristalline à 3 degrés près.

### ***Carte de déformation à 4,5% et 9% d'élongation***

L'ensemble de la grille (500 $\mu$ m x 500 $\mu$ m) a été analysé expérimentalement. Les cartes de déformation correspondant aux composantes E11, E22 et E12 du tenseur de Green Lagrange ont été obtenues par le logiciel « Corelmanuv », à partir des photographies de la grille 2 (G=450, distance de travail= 24mm, détecteur à électrons secondaires) à deux taux d'élongation.

Les valeurs obtenues ne sont pas corrigées du relief. La correction du relief, comme la valeur de la composante E33 ne peuvent être obtenues que par une étude stéréographique, nécessitant la prise de deux photos faites sur l'échantillon à plat et incliné. Nous avons fait le choix de négliger le relief ce qui, après analyse des résultats, ne s'est pas révélé judicieux.

$\epsilon=4,5\%$  : Les valeurs locales de E11, se situent entre 0 et 10%. On observe une alternance de bandes de couleur bleu clair et bleu foncé où E11 varie de 2 à 6% et dont l'orientation varie entre 45 et 40 degrés. Les bandes où la déformation est supérieure à 10%, (couleurs orange et rouge) sont situées soit au voisinage des joints de latte, soit dans les entités de faible dimension (lattes perpendiculaires au plan de la surface d'observation).

$\epsilon=10\%$ : La moyenne mesurée est  $\langle E11 \rangle = 9,9\%$ , la position des bandes est proche de celle observée à 4,5%. Les bandes alternées bleues claires et bleues foncées, correspondent à des déformations appartenant à l'intervalle 7-11%. Les localisations fortes au voisinage des joints

de lattes ou des anciens grains austénitiques peuvent atteindre 15 à 25% avec quelques pics à 30%. Les hétérogénéités sont intragranulaires, mais présentent une continuité à travers toute la structure.

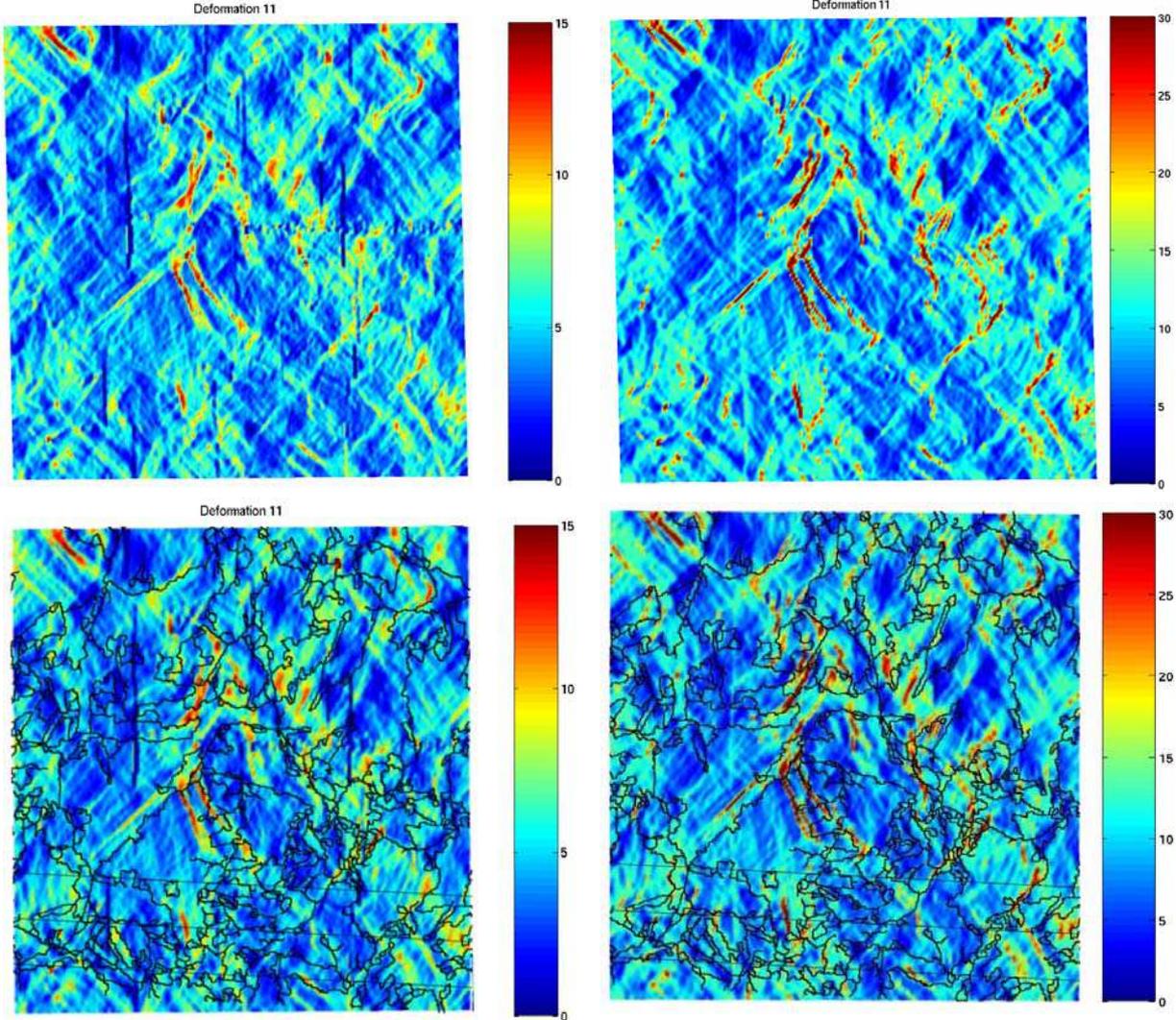


Figure III-7 : Carte de  $E_{11}$  dans la configuration non déformée pour une elongation  $e=4,5\%$  (gauche) et  $e=10\%$  (droite) (avec et sans joints de « grains »).

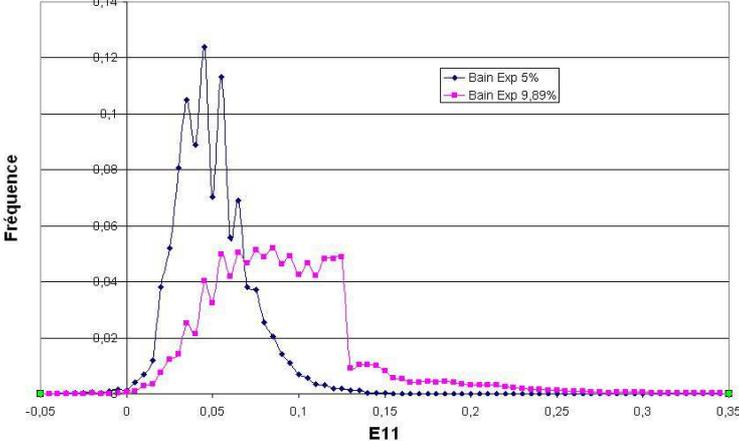


Figure III-8 : Histogramme de la déformation  $E_{11}$  pour  $e=4,5\%$  et  $e=10\%$ .

Les histogrammes (figure III-8) donnant E11, présentent des oscillations liées aux imprécisions de la mesure. Celles-ci diminuent avec le taux de déformation. La comparaison des deux courbes tend à montrer que le taux d'hétérogénéités, donné par la largeur à mi-hauteur des pics, augmente avec la déformation, en accord avec les résultats obtenus sur d'autres matériaux ([DOU00], [LIN97]).

Lignes de glissement ( $\epsilon=10\%$ ) :

Examinons la grille 2 et son voisinage.

Hors de la grille, à faible grandissement, on observe (Figure III-9a) un fort relief délimitant des zones présentant des lignes intenses, pouvant être attribuées à du glissement sinueux. A très fort grandissement, on constate que ce relief est dans sa majeure partie, dû à une ondulation de la surface (Figure III-9-b et Figure III-9-c), faisant ressortir les zones bainitiques par rapport aux zones plus dures, contenant de la cémentite. Les lignes de glissement sinueux, intenses mais peu nombreuses, sont plutôt présentes les lattes de bainite (ferritique), et peuvent traverser la cémentite.

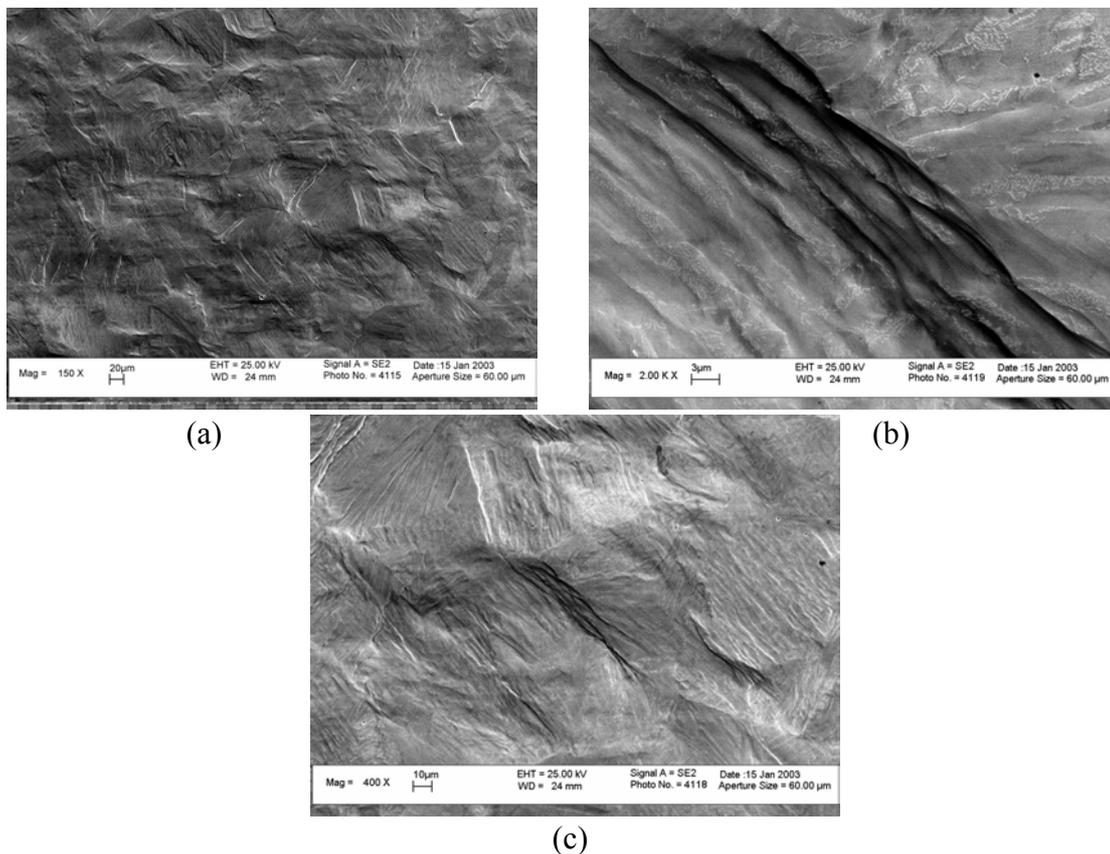


Figure III-9 : Bainite  $\epsilon=10\%$ , observations des lignes de glissement à proximité de la grille 2.

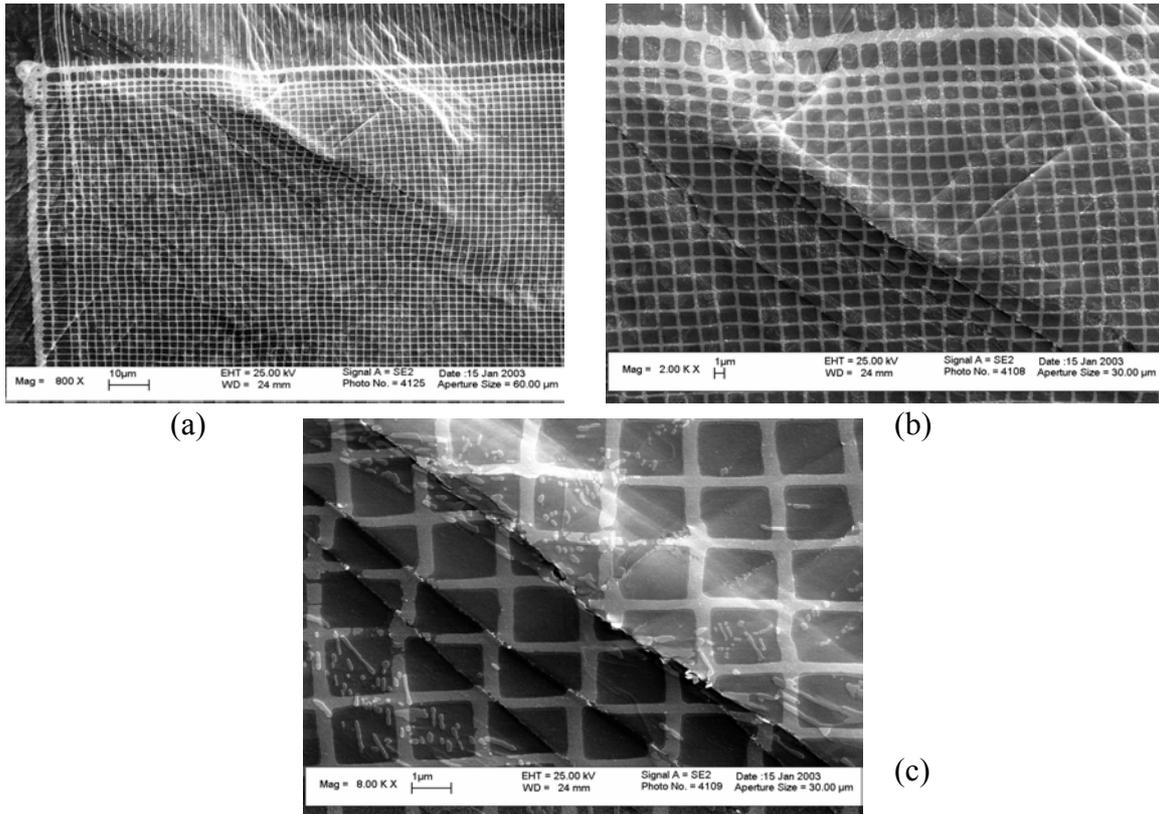


Figure III-10 : *Bainite,  $e=10\%$ , lignes de glissement et cisaillement.*

Les micrographies présentées sur la planche III-10 correspondent à la même zone analysée sous différents grossissements. On observe du glissement (cisaillement) accommodé par du glissement diffus perpendiculaire (figures (a) et (b)). Les bandes de cisaillement se situent préférentiellement dans la bainite à l'exception d'une bande qui traverse un paquet de cémentite (c). Cette zone apparaît en orange dans la carte de déformation (haut, droit).

Un phénomène « d'ondulation » est visible sur les micrographies de la figure III-11-a et de la figure III-11-b. Ce relief qui pourrait, à faible grossissement, être assimilé à des bandes de glissement, se révèle être des différences de déformation entre zones de ferrite et de cémentite. Des lignes de glissement diffuses sont visibles sur la micrographie de gauche, en haut à gauche. Les joints inter-lattes ou inter-entités cristallographiques, se distinguent nettement à cette échelle.

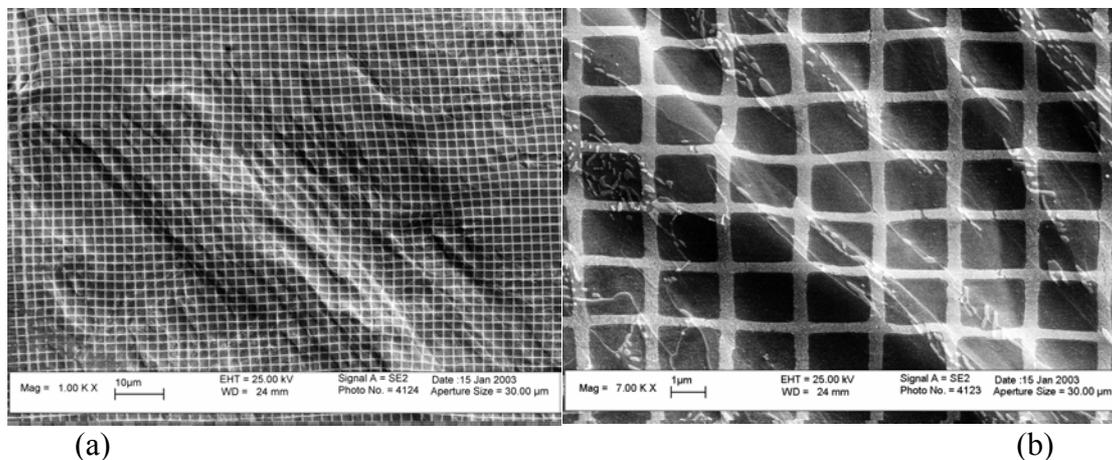


Figure III-11 : *Phénomène d'ondulation mettant en évidence les zones de ferrite et de cémentite.*

La micrographie de la figure III-12 (b) présente un paquet de lignes parallèles qui correspond à du relief au niveau des joints de lattes. Ces lignes correspondent aux deux bandes « orange » de la carte E11.

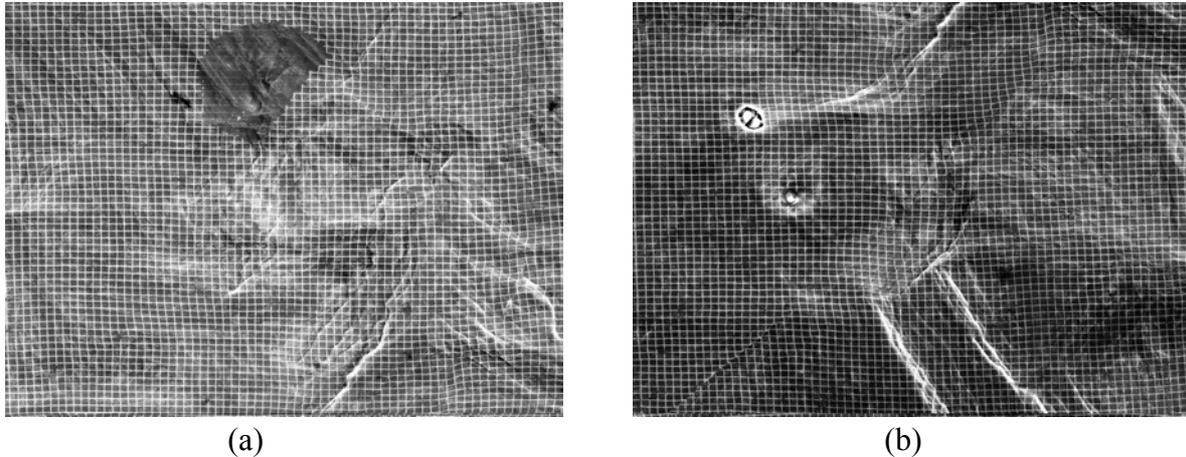


Figure III-12 : Bainite,  $e=10\%$ , exemples d'inhomogénéités de déformation.

Il est difficile de conclure sur le mode de déformation de la bainite supérieure revenue. On constate que :

- les zones ferritiques (phase molle) se déforment plus facilement que les zones bainitiques (phases dures) contenant des lattes de cémentite.
- les fortes déformations mesurées correspondent à du relief entre entités cristallographiques (paquets de lattes), ce qui signifie que le centre des grains se déforme sous forme de bandes alternées et que les joints entre paquets de lattes sont des zones dures. L'importance du relief, sous entend une forte incompatibilité de déformation entre ces paquets.
- de fortes déformations sont présentes dans les zones à fort gradient d'orientation.
- le glissement aux joints est rare mais présent.

Le relief des éprouvettes après déformation n'a pas permis d'obtenir une nouvelle texture locale. Un léger polissage aurait été nécessaire mais risquait de faire disparaître la morphologie initiale.

*Remarque : il faut garder à l'esprit que l'étude expérimentale est une étude en surface et que les comportements en surface et en volume sont probablement différents. En surface, la déformation plastique et la rotation du réseau cristallin sont plus faciles d'où, la formation d'hétérogénéités permettant d'accommoder les contraintes. En volume on doit s'attendre pour un essai de traction simple, à une texture locale plus faible, à des hétérogénéités moins importantes donc peut être à des contraintes internes plus élevées.*

*En résumé, les bandes de déformation mesurées par les microgrilles, dans les entités cristallographiques, correspondent aussi bien à du relief ferrite-bainite, qu'à du glissement grossier. Les déformations très intenses correspondent, quant à elles, à du relief, au niveau des joints entre paquets de lattes.*

### 3-2 Simulation numérique de la bainite revenue

Pour la simulation numérique, nous avons extrait un agrégat de  $600 \times 200 \mu\text{m}^2$ .

Compte tenu de la taille des entités cristallographiques, l'agrégat de bainite  $600 \times 200 \mu\text{m}^2$ , correspondant à la zone 2, a été maillé par des éléments cubiques à intégration réduite (C3D8R pour *ABAQUS*) de  $1 \mu\text{m}$  de côté. A chaque élément du maillage, on affecte l'orientation cristalline qui lui correspond. Au début de la déformation plastique, les éléments ont les mêmes densités de dislocations initiales. Au cours de la déformation, les densités de dislocations évoluent différemment dans chaque élément.

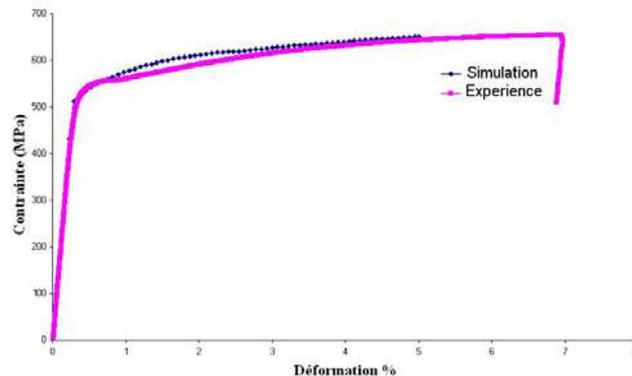


Figure II-12 : *Bainite, courbes de traction expérimentale et simulée.*

La courbe simulée se différencie de la courbe expérimentale dans le domaine de microplasticité, en revanche, la pente d'écrouissage est assez bien décrite. Deux effets peuvent expliquer cet écart, la faible représentativité de l'agrégat et une trop grande simplification de la description du début de la plasticité.

#### Résultats de la simulation

Examinons maintenant les cartes de la texture locale et des contraintes après déformation.

Pour des elongations  $e=9\%$  et  $e=15\%$ , sur les planches III-13 et III-14 sont données:

- L'orientation simulée de l'agrégat après déformation.
- Les cartes de la composante  $E_{11}$
- Les cartes des contraintes  $S_{11}$
- La carte des contraintes de von Mises

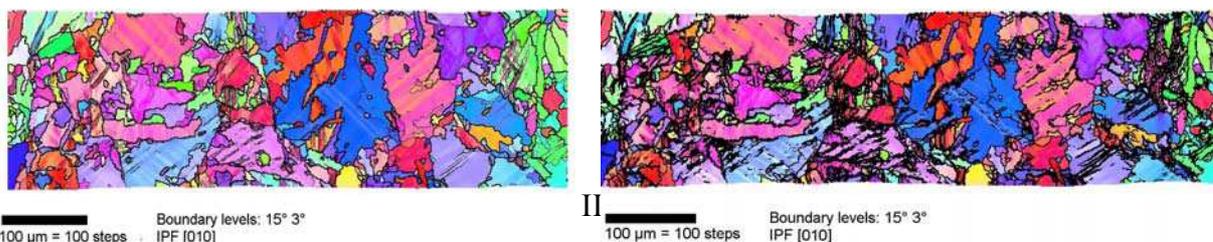


Figure III-13 : *Bainite, carte des orientations de l'axe de traction pour  $e=9\%$  (gauche) et  $e=15\%$  (droite).*

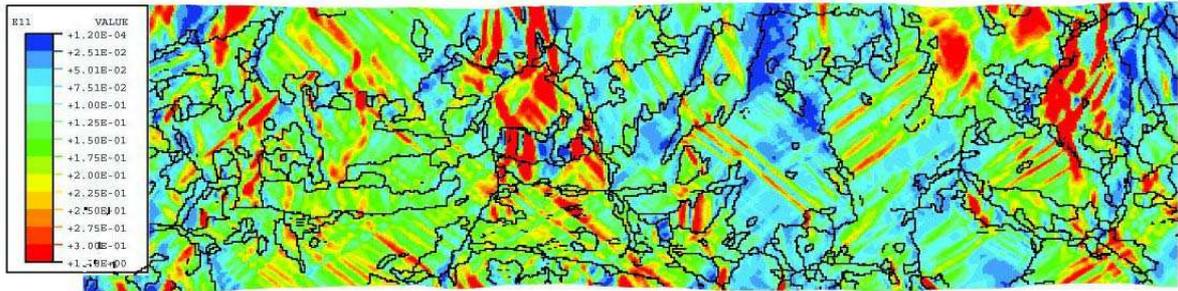
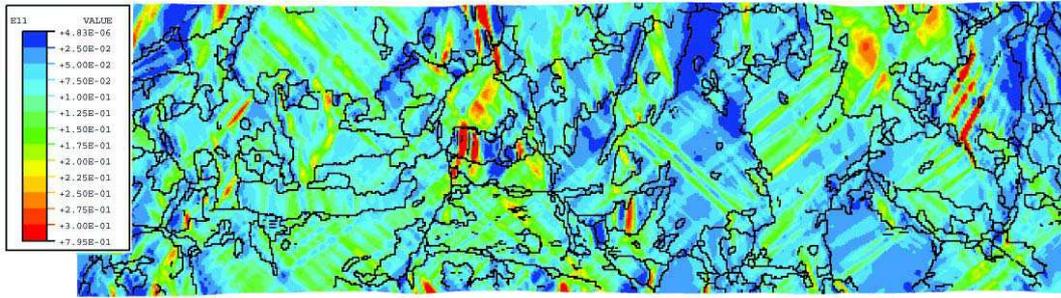


Figure III.14 (a) : Bainite, composante E11, cartes simulées pour  $e=9\%$  et  $15\%$ .

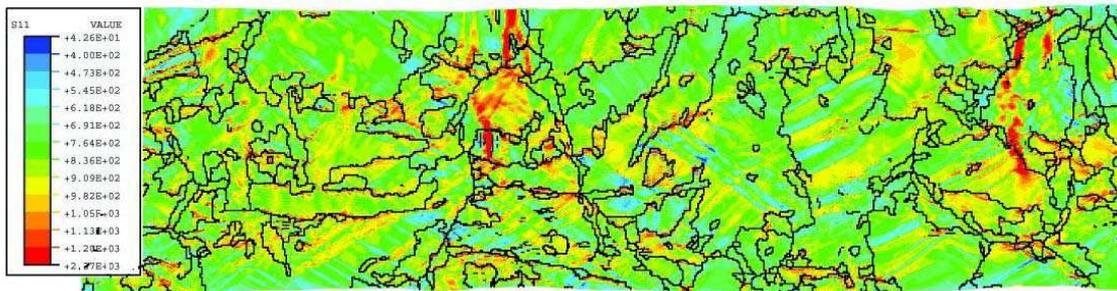
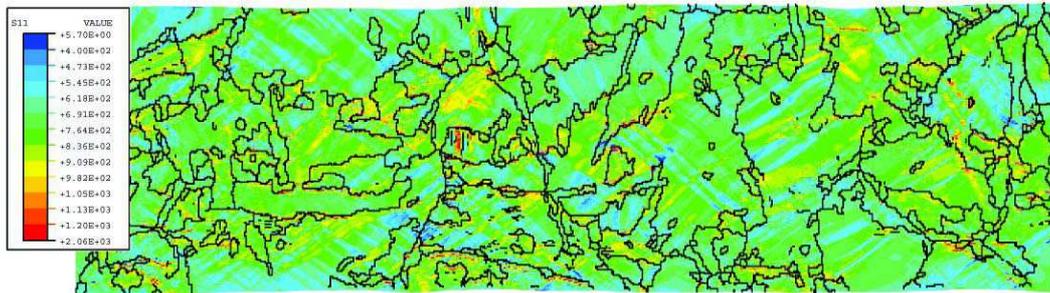


Figure III.14 (b) : Bainite, carte de la composante S11 pour  $e=9\%$  et  $e=15\%$ .

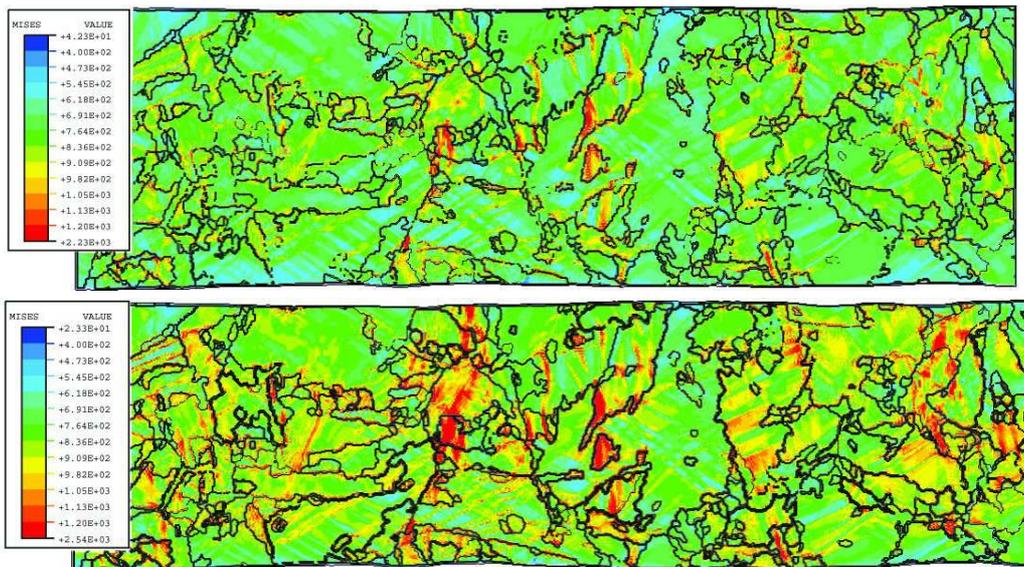


Figure III-14 (c) : Bainite, carte des contraintes de von Mises ( $\epsilon=9\%$  et  $\epsilon=15\%$ ).

## Discussion des résultats

### *Formation de sous joints*

Pour  $\epsilon=9\%$ , la carte des orientations montre l'existence de bandes de rotation très faible dans les grains de tailles élevées. Pour  $\epsilon=15\%$ , ces bandes de rotation s'accroissent jusqu'à donner des sous joints ou parois. La désorientation entre les bandes de déformation et la matrice dépasse parfois 5 degrés. On note une forte densité de sous joints dans les entités de petites tailles (lattes perpendiculaires à la surface observée ?).

### *Répartition spatiale des déformations et des contraintes*

Les cartes de déformation E11 mettent en évidence des bandes de déformation intragranulaires dans les entités cristallographiques. La largeur de ces bandes correspond à  $2UA$  ( $2\mu\text{m}$ ), donc dépend du maillage. Notons, dans certains grains voisins, une continuité des bandes de part et d'autre des interfaces. Pour  $\epsilon=15\%$ , la déformation peut atteindre 20 à 30% dans certaines bandes.

La carte E33 correspond au relief, elle met en évidence de forts gradients dans certaines entités cristallographiques et une absence de relief dans quelques grains d'orientation « bleue ».

Les cartes de contraintes reproduisent en « négatif » les cartes des déformations. En effet, les cartes de contrainte S11, présentent des minima d'intensité dans des bandes intragranulaires très déformées et des maxima près de l'interface bande-matrice. Ce phénomène peut trouver son origine dans une variation de la nature et de l'amplitude du glissement, dans et hors des bandes. Il se traduit plus directement par des bandes de rotation. Il faut noter que les bandes de contrainte semblent provenir des interfaces entre entités et que leur largeur augmente avec la déformation.

*Remarque* : on note des contraintes de l'ordre de 1200MPa au voisinage immédiat de joints parallèles et perpendiculaires à l'axe de traction DT (discontinuité de la contrainte S11, liée aux incompatibilités de déformation de grain à grain).

### Evolution des hétérogénéités de déformation

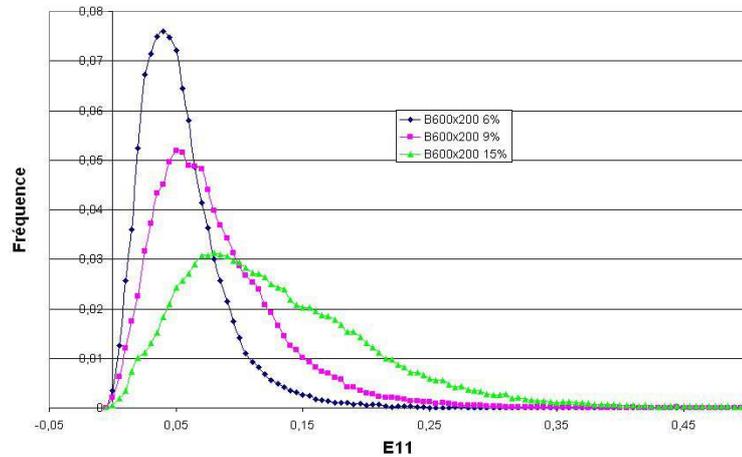


Figure III-15 : Histogramme de E11 à 6%, 9% et 15%.

On constate que la largeur des pics, donc les hétérogénéités de déformation, augmentent, en valeur absolue, avec l'élongation. Cela est moins net en valeur relative. Notons que les maxima atteignent respectivement 20%, 25% et 35%. Ils sont localisés à l'intérieur des entités cristallographiques. Dans la bainite les contraintes internes sont intragranulaires.

### Evolution des contraintes internes

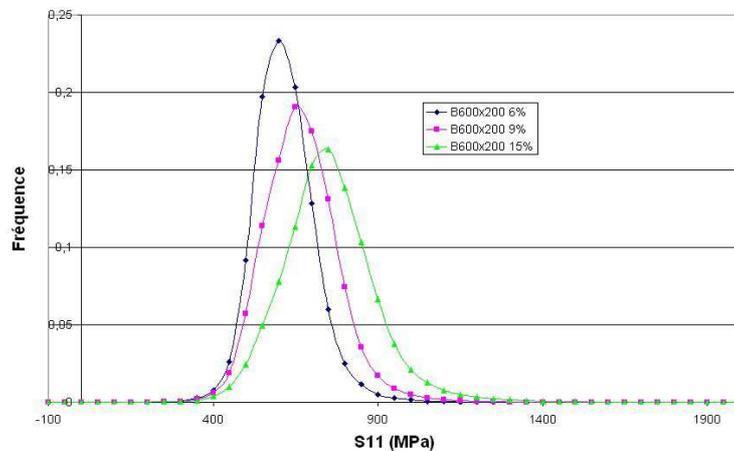


Figure III-16 : Histogramme de la contrainte S11 pour e=6%, e=9% et e=15%.

La largeur des pics augmente faiblement en valeur absolue, ce qui signifie que l'hétérogénéité de contraintes internes augmente peu avec la déformation. Les pics se déplacent d'environ 100MPa avec l'augmentation du taux d'élongation.

Les valeurs moyennes calculées sont égales respectivement à :

$$e=6\% \quad \langle E11 \rangle = 5,6\% \quad \langle S11 \rangle = 693 \text{ MPa}$$

$$e=9\% \quad \langle E11 \rangle = 8,40\% \quad \langle S11 \rangle = 743 \text{ MPa}$$

$$e=15\% \quad \langle E11 \rangle = 13,5\% \quad \langle S11 \rangle = 827 \text{ MPa}$$

Ces résultats sont en accord avec le faible durcissement mesuré sur les courbes de traction.

La carte des contraintes de von Mises atténue les maxima. Les différences entre S11 et la contrainte de von Mises montrent que l'état de contrainte s'écarte, dans les grains de petite taille, d'un état de traction pure.

**Comparaison des cartes expérimentale et simulée de E11 pour une elongation expérimentale de 10% et une simulation de 9% :**

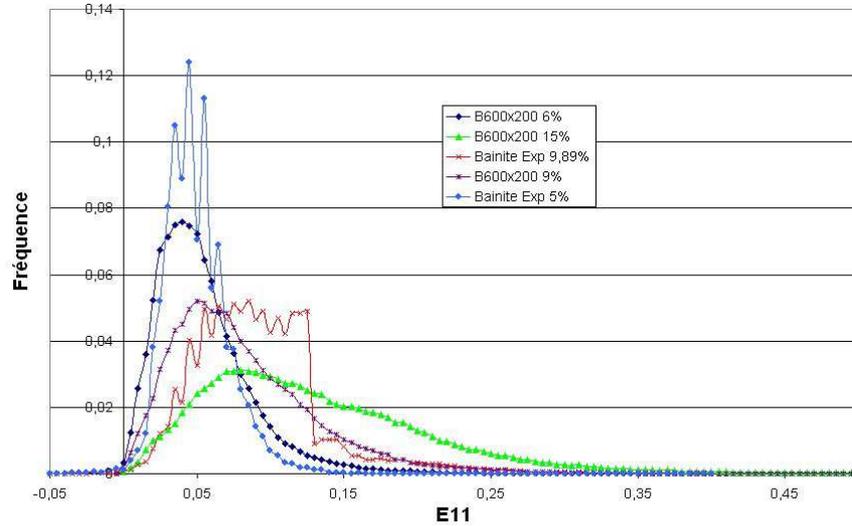


Figure III-17 : Histogramme de E11 mesures et simulations.

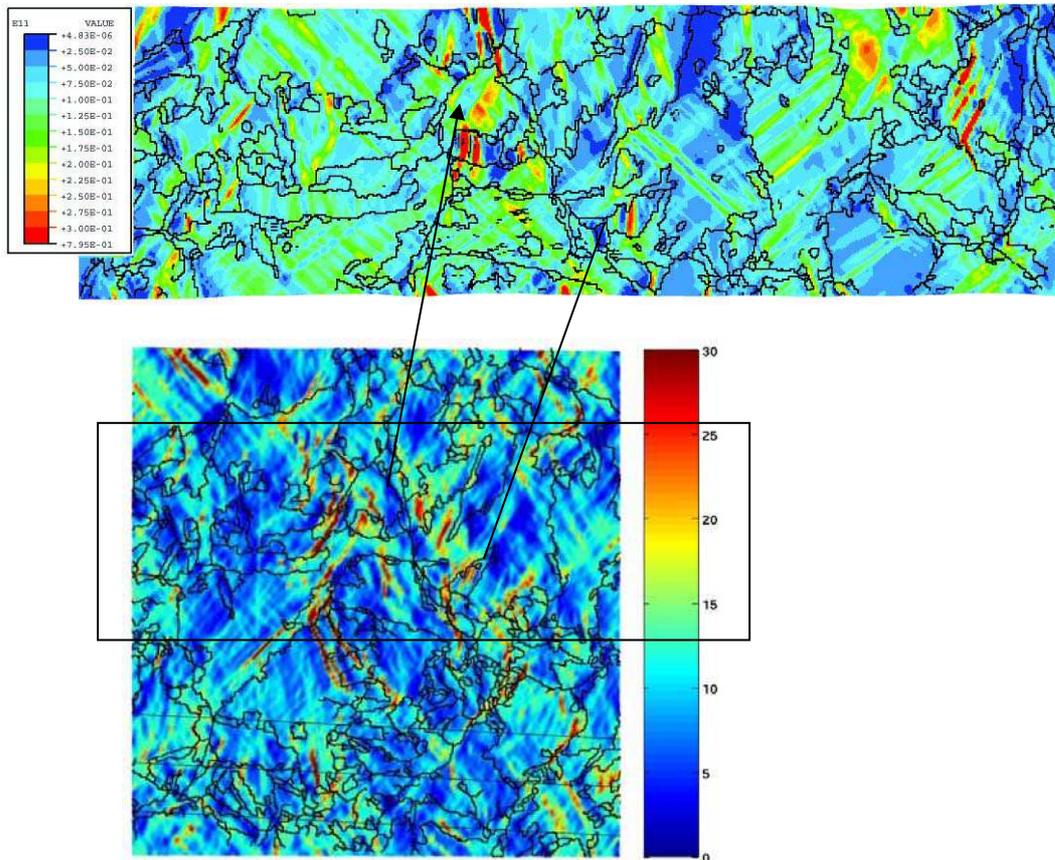


Figure III-18 : Comparaison des cartes simulée à  $e=9\%$  et expérimentale à  $e=10\%$ .

- L'expérience et la simulation s'accordent sur la présence de bandes intragranulaires dans les gros grains, même si, pour quelques grains, les bandes sont dans la simulation à  $+45^\circ$  de l'axe de traction et à  $-45^\circ$  dans l'expérience. Les différences d'orientation + ou - peuvent s'expliquer par le nombre de systèmes de glissement d'orientation proche donc susceptibles d'être actifs. Des systèmes différents peuvent conduire à une même déformation. Les observations des lignes de glissement ont montré que la nature des bandes est assez complexe. En effet, le matériau se comporte comme un biphasé ferrite-bainite. La nature biphasée du matériau étant intégrée en 'moyenne' dans la loi de comportement, la simulation ne peut prévoir que des hétérogénéités de glissement.
- Comparons les histogrammes des déformations longitudinales mesurées et simulées ( $\epsilon_{exp}=10\%$  et  $\epsilon_{sim}=9\%$ ). En moyenne les histogrammes montrent un bon accord simulation/expérience. Les largeurs des pics à mi-hauteur correspondant à la mesure sont supérieures à celles correspondant à la simulation et présentent des oscillations dues aux erreurs de mesure.
- Le fort relief conduit à une erreur sur l'estimation expérimentale de E11. La carte E33 met bien en évidence le relief dû aux bandes de déformation intragranulaires et aux joints des entités cristallographiques.

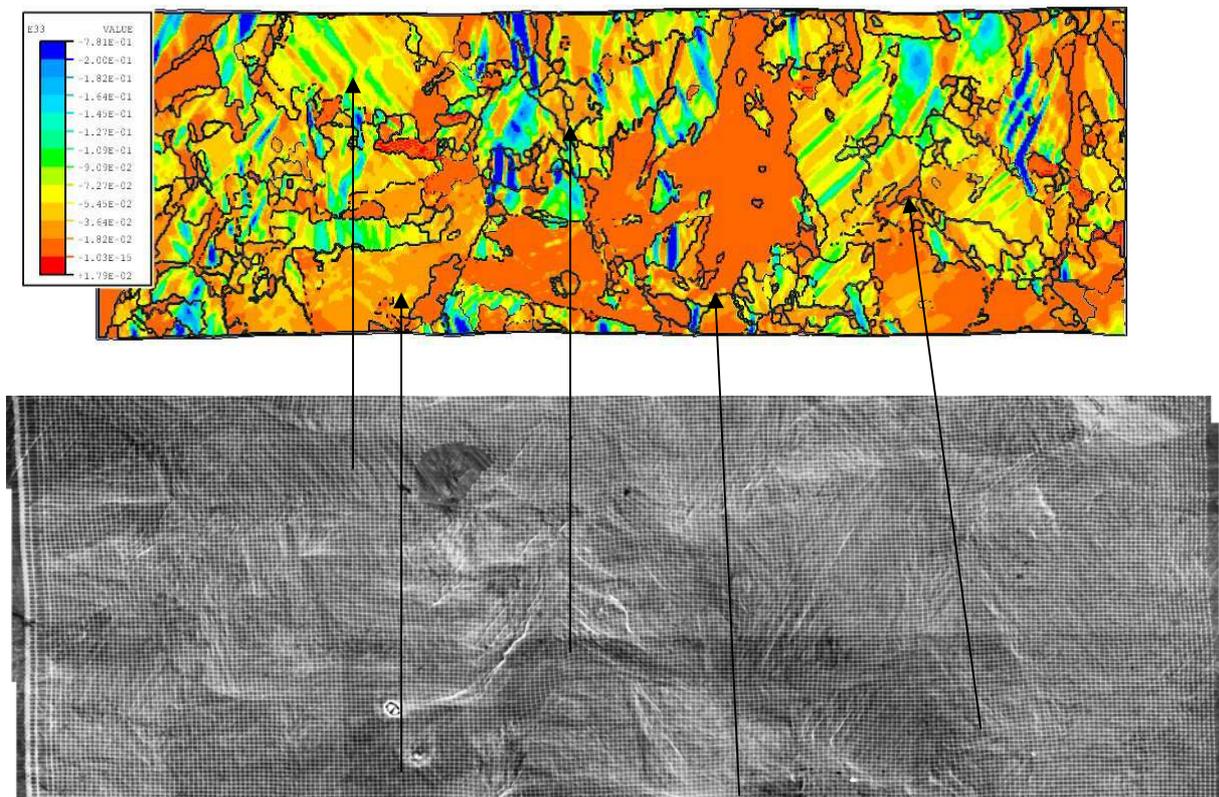


Figure III-19 : *Comparaison simulation de la composante E33 et du relief observé expérimentalement.*

- Les maxima expérimentaux et simulés sont localisés dans des zones identiques mais pas exactement au même endroit.
- Notons que les bandes intragranulaires ont une largeur de 1 à  $4\mu\text{m}$  (taille du maillage !).

- Si on retrouve les bonnes tendances et les bons ordres de grandeur, l'accord reste qualitatif.

## 4 ANALYSE EXPERIMENTALE ET NUMERIQUE DE LA MARTENSITE REVENUE

L'agrégat de martensite (zone-test) de  $300 \times 100 \mu\text{m}^2$  a été maillé avec des éléments cubiques C3D8R, de  $0,5 \mu\text{m}$  de coté. Ce qui conduit à environ 20 éléments par paquet de lattes de  $10 \mu\text{m}$ .

### 4-1 Etude expérimentale de la martensite revenue

Les 4 zones préalablement orientées, n'ont pu être utilisées du fait de l'oxydation survenue lors du dépôt de grilles. Une autre zone (zone-test) a donc été orientée et analysée du point de vue des lignes de glissement, puis modélisée.

Les orientations des axes DL, DT, DN de la zone-test ( $300 \times 250 \mu\text{m}^2$ ), sont données sur la figure III-20.

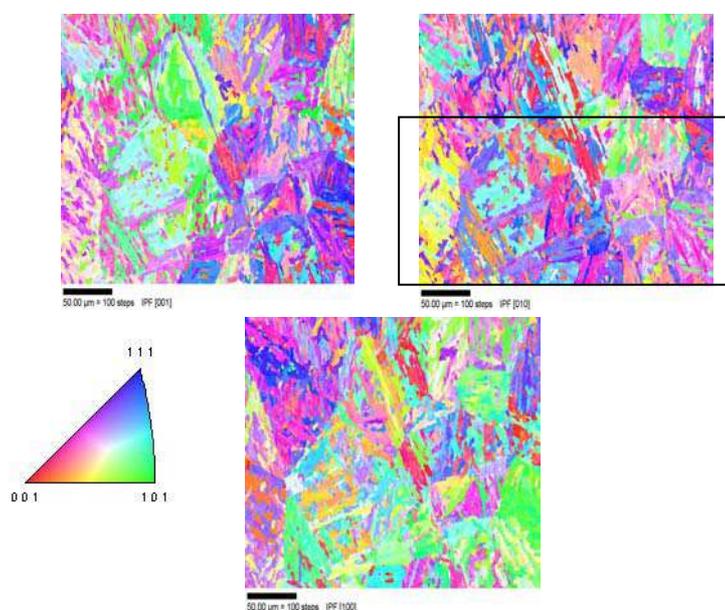


Figure III-20 : *Texture locale (DL (1), DT (2), DN (3)) de la zone étudiée.*

### Lignes de glissement (zone-test) à 8% d'élongation

Comme pour la bainite, la déformation se manifeste par un fort relief aux joints de lattes. Les joints de lattes sont distants de 100 nm à  $1 \mu\text{m}$  et décorés de carbures. Les lignes de glissement, quant à elles, sont très difficiles à observer, plus fines et plus courtes que dans la bainite, elles apparaissent au voisinage des nœuds triples et aux joints de lattes où elles relaxent les contraintes. En général, un seul plan de glissement actif est visible. Les lignes de glissement semblent traverser les joints de lattes appartenant à un même paquet et présentent la même orientation d'une latte à l'autre. Le relief est d'autant plus important que les joints de latte (ou paquet de lattes) sont orientés à environ  $45^\circ$  de l'axe de traction. L'impression de relief, vient probablement de ce que les interfaces (zones dures) ne se déforment pas, contrairement aux centres des lattes, même si on observe des lignes de glissement au voisinage des joints. Les figures III-21 et III-22, illustrent les observations dans la zone test.

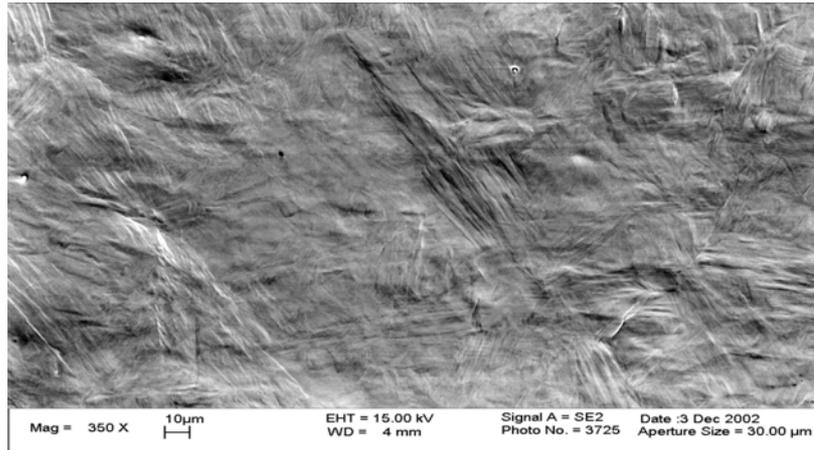


Figure III-21 : *Martensite e=8%*.

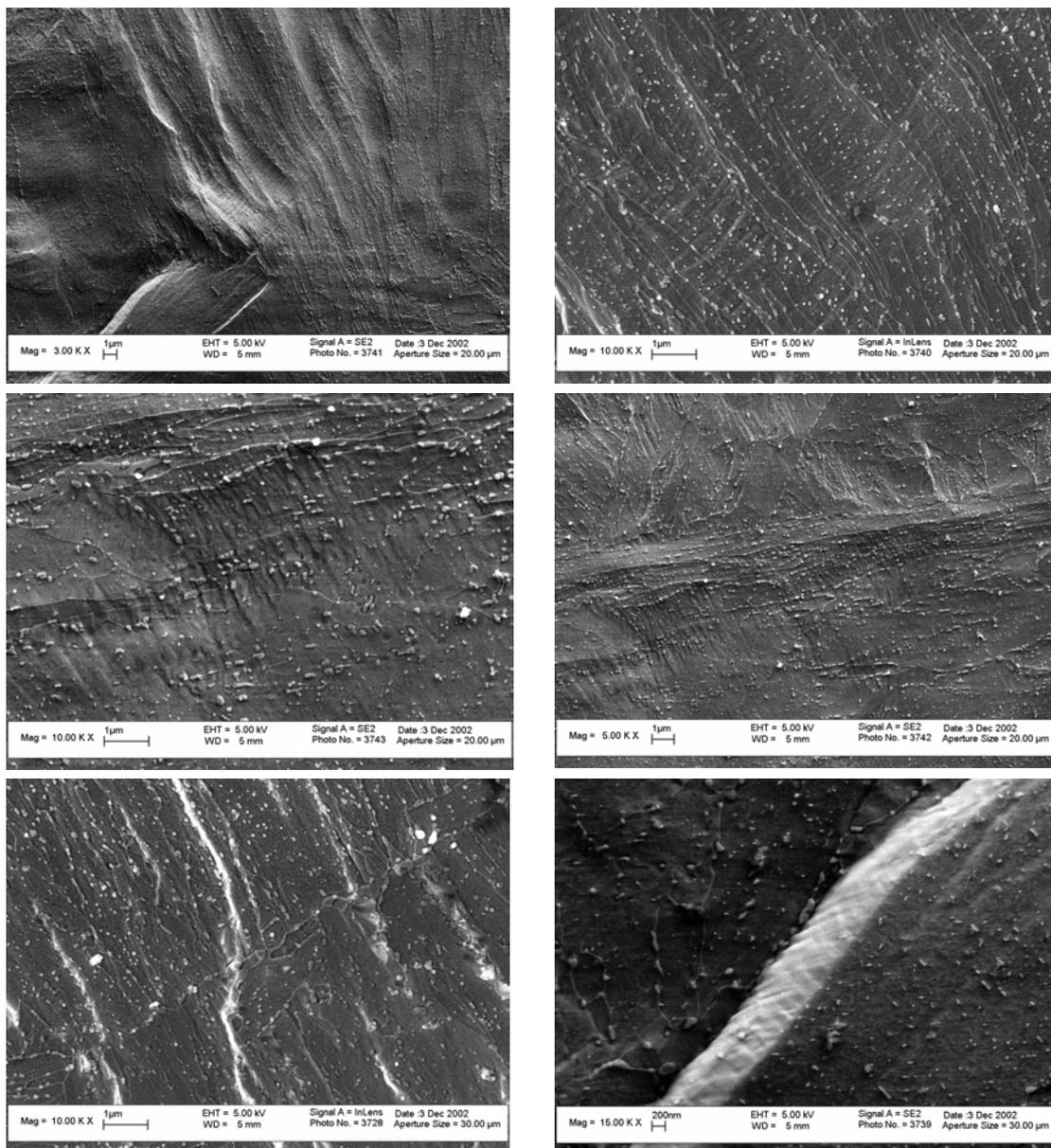


Figure III-22 : Détails de la figure III-21  $e=8\%$  (LEO-Gemini, In-Lens et SE2).

#### 4- 2 Simulation numérique de la martensite revenue

Ne disposant pas de mesure de déformation, le relief observé servira de test de validation. Sur la figure III-23 sont superposés l'orientation mesurée par EBSD et le relief observé à 8%.

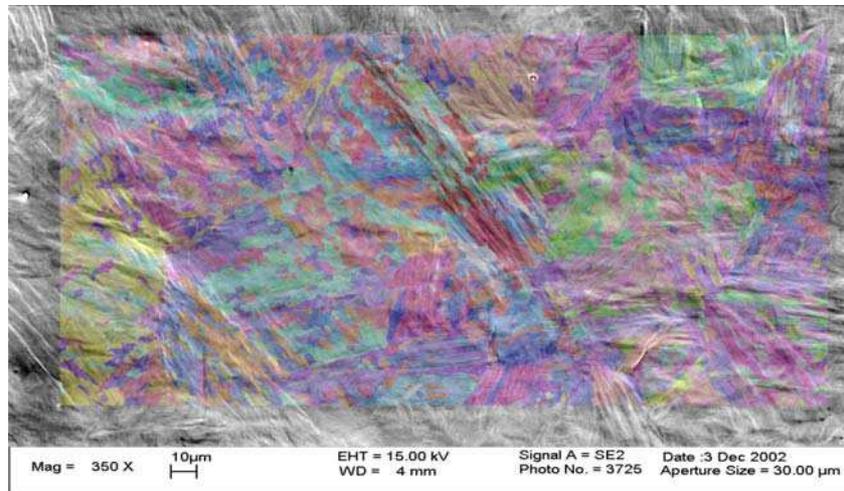


Figure III-23 : *Martensite revenue, superposition de la micrographie de la zone test obtenue au MEB à 8% et de l'orientation cristalline.*

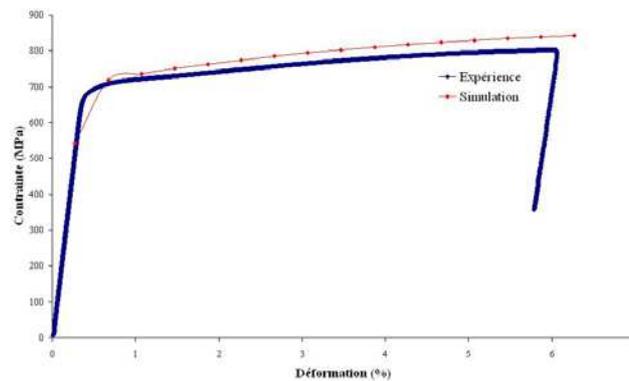


Figure III-24 : *Courbes de traction expérimentale et simulée.*

Dans la planche III-25, sont données :

- L'orientation simplifiée de l'agrégat (les nuances de couleur, représentant de faibles fluctuations de l'orientation autour d'une orientation moyenne de chaque entité cristallographique n'ont pas été prises en compte).
- La carte de la composante E11 (4,5%)
- La carte des contraintes S11 (4,5%)
- La carte des contraintes de von Mises (4,5%)

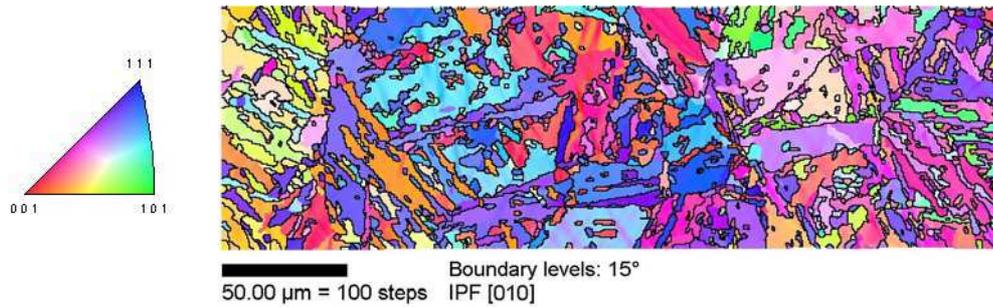


Figure III-25 (a) : Orientation de l'axe de traction avant déformation.

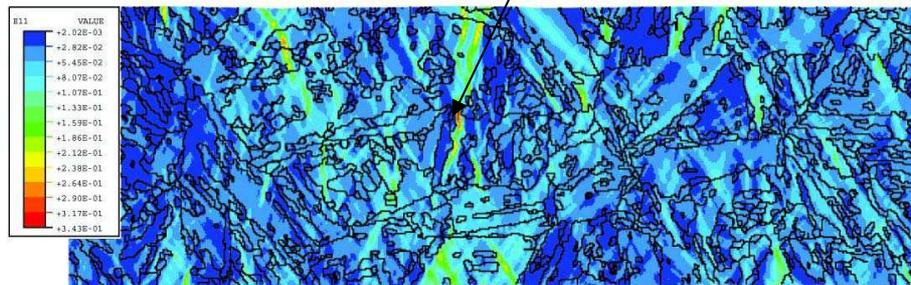
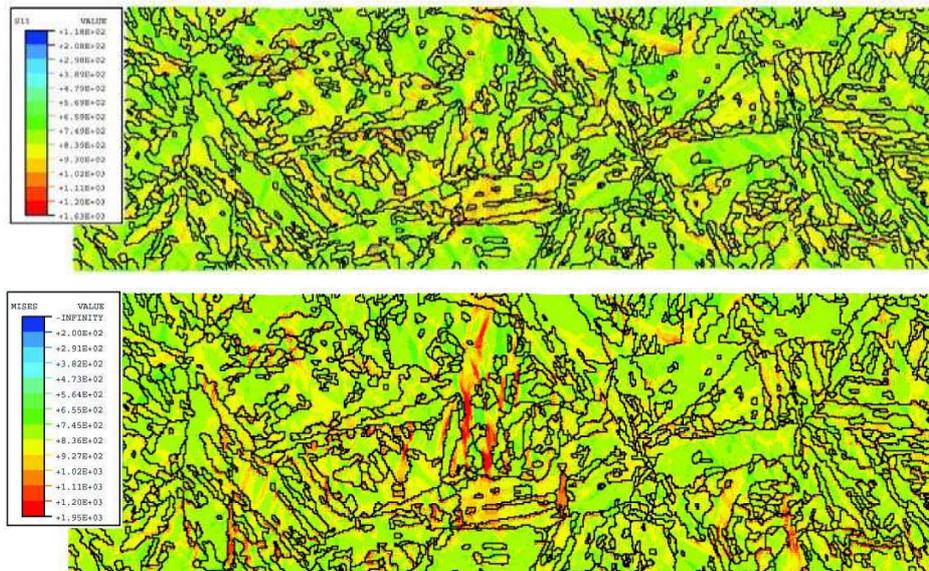


Figure III-25 (b) : Carte de la composante  $E_{11}$  pour une elongation de 4,5%.



Figures III-25 (c) et (d) : Composantes  $S_{11}$  et contrainte équivalente au sens de von Mises (4,5%).

Pour  $e=4,5\%$  les bandes de déformation sont plus fines que dans la bainite (épaisseur de quelques micromètres), ce qui est en relation avec la finesse de la microstructure. On retrouve de fines bandes de déformation atteignant 10% (bleu clair) dans une matrice à 2% (bleu foncé). En revanche, la zone centrale, notée C, (planche III-25.b) présente une déformation  $E_{11}$  de 34%. Cette zone correspond à deux lattes adjacentes d'orientation « rouge » et « bleu ». Expérimentalement, cette zone ne présente pas de relief extrêmement important (figure III-23).

A 7,5%, la zone C présente une localisation intense qui empêche toute déformation du reste de l'éprouvette. La simulation a donc été arrêtée.

A  $\epsilon=4,5\%$ , la carte S11 présente des variations de 600 à 1200MPa dont les maxima correspondent aux minima de déformations. Ces maxima, contrairement à la bainite, sont aussi bien intergranulaires qu'intragranulaires dans les plus grosses entités cristallographiques.

Expérimentalement, la localisation intense qui a conduit à l'arrêt des simulations n'a pas été observée. Il y a donc au niveau du calcul, un effet fort de ce couple d'orientations qu'il faut examiner plus en détail.

## 5. Discussion des résultats

Pour la bainite, la comparaison des résultats expérimentaux et simulés est qualitativement satisfaisante.

Les écarts ont plusieurs origines :

- Les cartes expérimentales ne prennent pas en compte le relief.
- Dans le modèle, on considère un matériau monophasé qui se déforme plastiquement comme de la ferrite avec des propriétés mécaniques plus élevées dues à la présence des carbures. Cela revient à supposer que l'aspect biphasé est du second ordre par rapport aux effets de la morphologie et de l'orientation. Les observations de la surface montrent au contraire, des différences de comportement des zones de ferrite et de bainite. Bien que les analyses par la technique EBSD puissent fournir l'emplacement des paquets de cémentite (chapitre II), les deux phases ne seront pas prises en compte, dans cette thèse, pour des raisons de complexité et de temps de calcul.
- Dans la martensite, la simulation montre que le couple d'orientations noté rouge-bleue conduit à une localisation intense qui ne correspond pas aux observations. Ce phénomène vient probablement de la modélisation d'une seule couche de matériau. Les surfaces permettent une forte rotation du réseau cristallin qui n'existe pas dans le matériau massif.

D'autres critiques plus générales peuvent être portées sur le modèle. On peut citer :

- Les conditions aux limites, très délicates dans un essai de traction simple,
- La représentativité de l'agrégat
- La description de l'érouissage qui ne prend en compte que des interactions du type forêt et néglige les interactions avec les précipités, même si ceux-ci sont introduits en moyenne lors de l'identification du comportement.

Afin d'éclaircir ces différents points, nous allons, dans le chapitre suivant :

- Déterminer l'aptitude du modèle à décrire les trois stades de déformations des monocristaux de ferrite. En effet le modèle a toujours été testé et validé dans le cas des grandes déformations dans la gamme 10% - 40%.
- Examiner à partir des identifications faites sur les polycristaux de bainite et de martensite, le comportement de «monocristaux» de bainite et de martensite revenues et déterminer les systèmes actifs et latents et les rotations de réseau.
- Calculer les contraintes internes dans des bicristaux, présentant deux grains d'orientation Rouge et Bleue.

- Modifier les conditions aux limites, en ajoutant une couche de milieu homogène équivalent.

Les temps de calculs ne nous permettent pas d'effectuer cette étude sur les agrégats présentés dans ce chapitre. Nous utiliserons des agrégats plus petits dont la morphologie et les orientations seront déterminées par la technique EBSD.



# CHAPITRE IV

## ETUDE PARAMETRIQUE

L'objectif de ce chapitre est de déterminer l'origine des écarts entre les résultats numériques et expérimentaux. Seront examinés les influences des couples d'orientation spécifique, de la morphologie, c'est-à-dire la largeur des paquets de lattes (quelques micromètres dans la martensite et quelques dizaines de micromètres dans la bainite) et des surfaces libres.

Ce chapitre comportera trois grandes parties :

- Une étude du comportement monocristallin de quatre orientations représentatives des matériaux, afin de mettre en évidence les orientations molles et dures. Afin d'avoir des points de comparaison avec la littérature, l'effet de l'orientation sur la réponse en traction de monocristaux de ferrite sera d'abord étudié, puis seront présentées les réponses de « monocristaux » de bainite et de martensite dont le comportement est déduit des paramètres matériaux identifiés sur les polycristaux.
- Une étude des effets des surfaces libres. Les surfaces libres ont un rôle non négligeable sur la réponse des agrégats, mais l'importance est plus ou moins grande, selon la taille des paquets de lattes ou des entités cristallines. Dans le cas de la martensite, les observations sont fortement influencées par la couche inférieure située à quelques micromètres de la surface.

La simulation d'un agrégat 3D avec des orientations aléatoires ne nous a pas paru adéquate compte tenu des objectifs de cette étude qui privilégie les interactions de grains à grains. Nous comparerons donc la réponse d'agrégat une couche, avec la réponse d'un agrégat formé d'une couche de grains et d'un milieu homogène équivalent, censé représenter une couche de grains inférieure.

- Une étude du rôle de la morphologie et des orientations cristallines.

Les agrégats étudiés ici, diffèrent des agrégats du chapitre III, de part leur taille (1/4 de la taille des agrégats précédents) et de par leur motif.

### 1- ETUDE DU COMPORTEMENT MONOCRISTALLIN

#### 1-1 Monocristaux de ferrite

Les paramètres « matériau » du modèle sont ceux identifiés par P. Eriau sur un acier IF déformé en traction, compression, cisaillement (tableau IV-1). La validation du modèle avait été faite pour des déformations supérieures à 10% mais pas pour des faibles ou moyennes déformation.

C11 (Gpa)	C12 (Gpa)	C44 (Gpa)	$\tau_0$ (Mpa)	b (nm)	n	K	G (nm)	$\dot{\gamma}_0$ s <sup>-1</sup>	$\rho_0$ (mm <sup>-2</sup> )	$a^{ss}$
219,540	78,125	70,70	200	0.257	100	41	8	10 <sup>-11</sup>	1.5 10 <sup>4</sup>	0.25

Tableau IV-1 : Coefficients pour la simulation du comportement de la ferrite (Ph. Eriau).

Quatre orientations présentées dans le tableau IV-2 et correspondant à des orientations rencontrées dans la bainite et la martensite sont étudiées.

Les orientations étudiées sont données par leurs angles d'Euler. Les noms des orientations correspondent au code de couleur du logiciel OIM de traitement de données EBSD.

.Orientation	Angles d'Euler			Système primaire	Facteur Schmid de	Système secondaire	Facteur Schmid de
	$\phi_1$	$\Phi$	$\phi_2$				
BL : Blanche	215,5	101	119,8	22	0,46	21	0,44
B : Bleue	284	124,4	131,3	11	0,48	19	0,39
R : Rose	232,8	102,6	76,8	16	0,46	14	0,45
V : Verte	11,5	89,8	51,1	6	0,49	1	0,46

Tableau IV 2 : Orientations utilisées pour la simulation du comportement du monocristal.

La simulation est réalisée sur un maillage de 12\*4\*1 éléments 3D à intégration réduite.

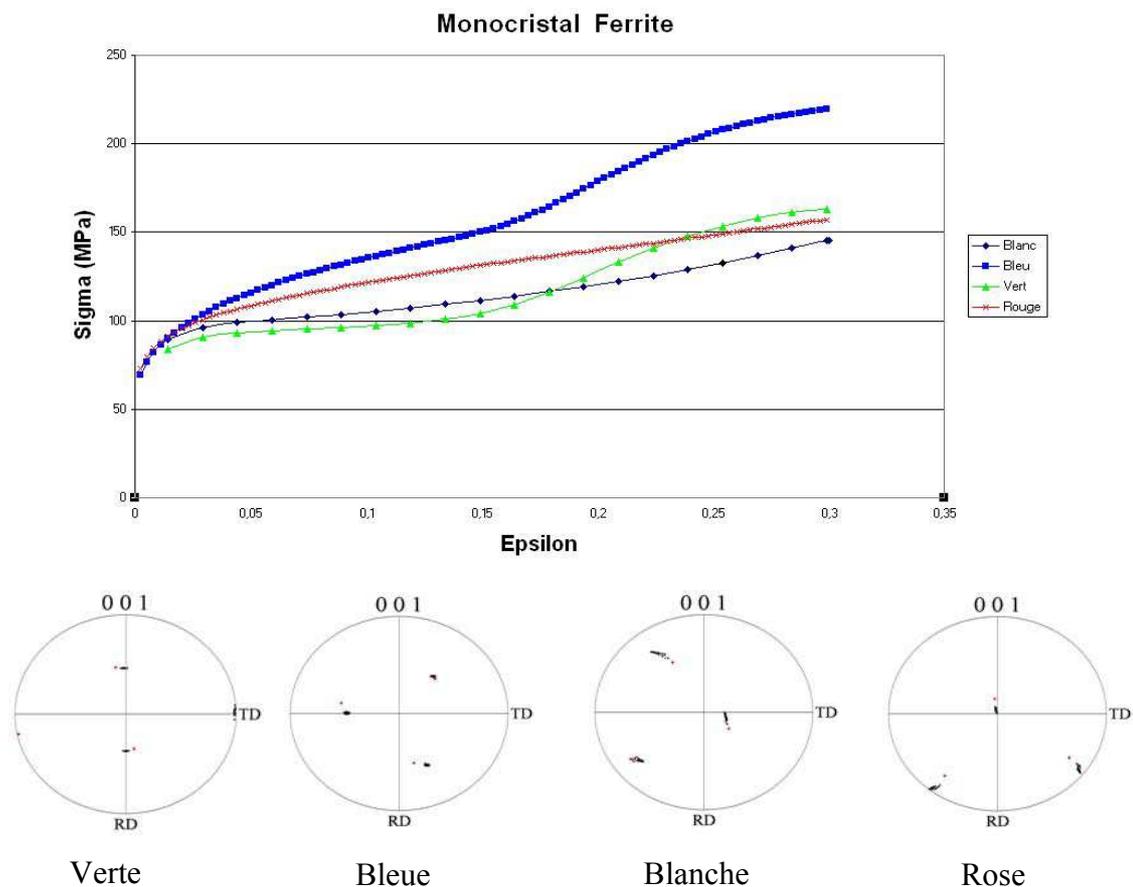


Figure IV-1 : Courbes  $\sigma - \epsilon$ , pour les quatre orientations et figures de pôle donnant la rotation des axes [001] après 30% de déformation macroscopique (les points en couleur représentent l'état avant déformation).

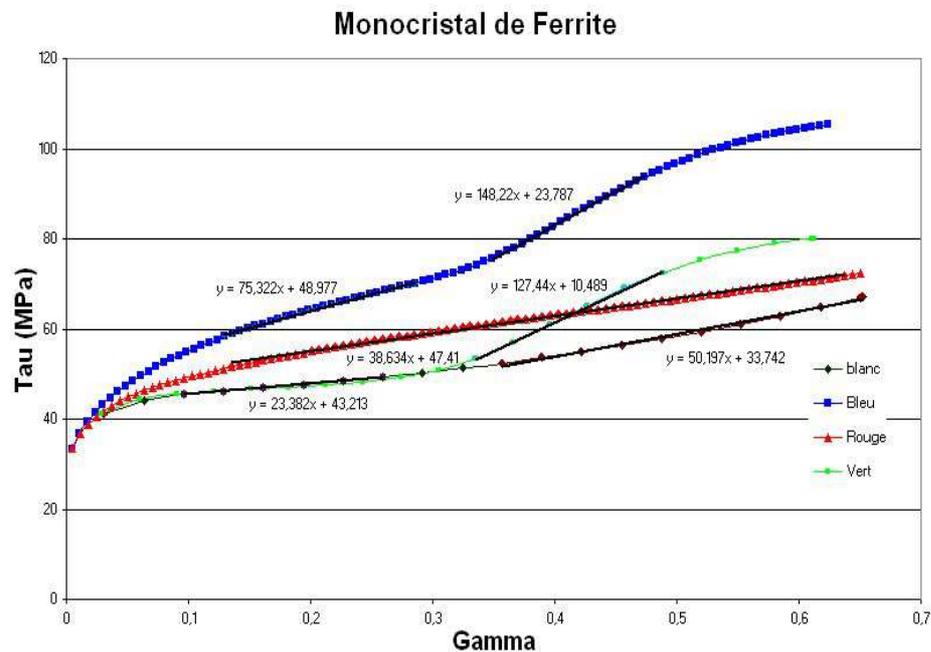


Figure IV-2 : Courbes  $\tau$ -  $\gamma$ , pour les quatre orientations.

Selon la littérature [SK70], le domaine du stade I est compris entre 9 à 14%, les pentes des stades II et III entre  $G/2000$  et  $G/2700$  et  $G/900$  et  $G/500$ , respectivement.

La simulation prévoit un stade I trop important compris entre 15 à 30%. La pente du stade II est comprise entre 148MPa et 50MPa pour un module de cisaillement de 78MPa, ce qui est globalement satisfaisant. On constate que les orientations B et V, pour un essai de traction simple, sont plus dures que les orientations BL et R et qu'elles conduisent à une rotation plus faible.

## 1-2 Comportement de 'monocristaux' de bainite et de martensite

Les comportements de ces orientations sont simulés à partir des coefficients matériaux identifiés sur les courbes de traction de polycristaux de bainite et de martensite. Ces valeurs sont données dans le tableau II. Les courbes  $\sigma$  -  $\epsilon$  obtenues et les rotations pour chaque orientation, sont présentées sur les figure IV- 3 et IV-4.

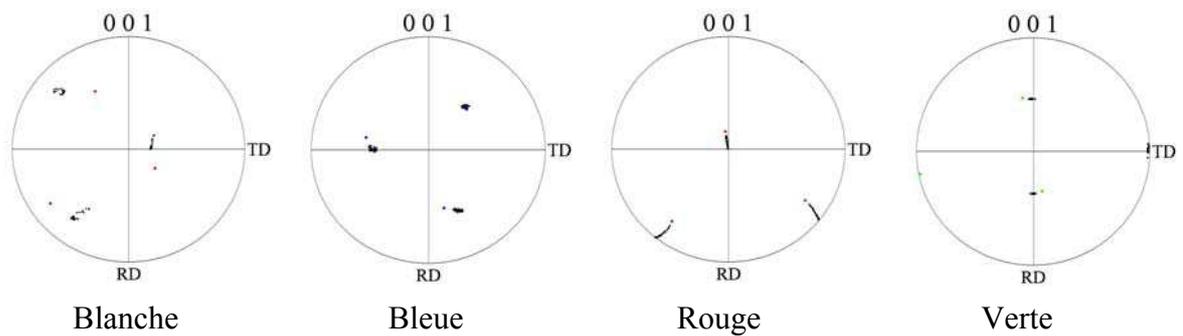
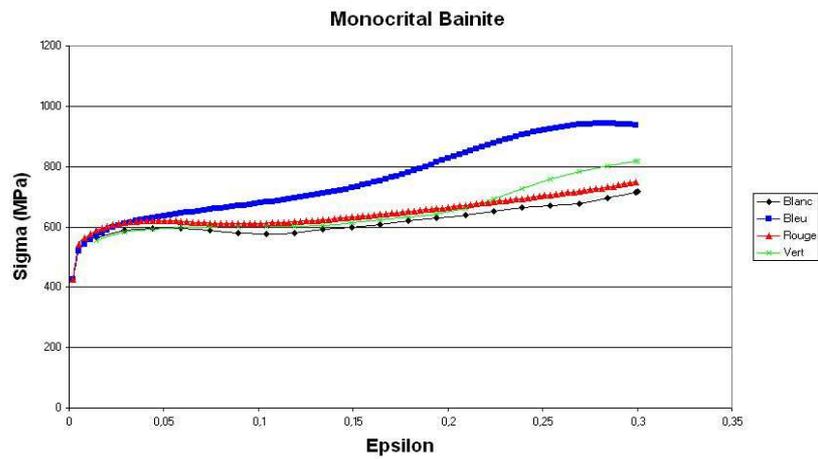


Figure IV-3 : Courbes  $\sigma$ -  $\epsilon$  pour les quatre orientations et évolution de celle-ci après 30% de déformation macroscopique (les points en couleur représentent l'état avant déformation).

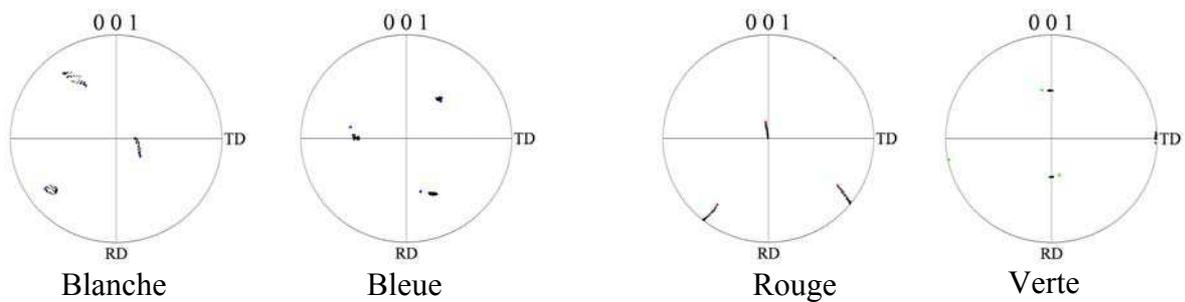
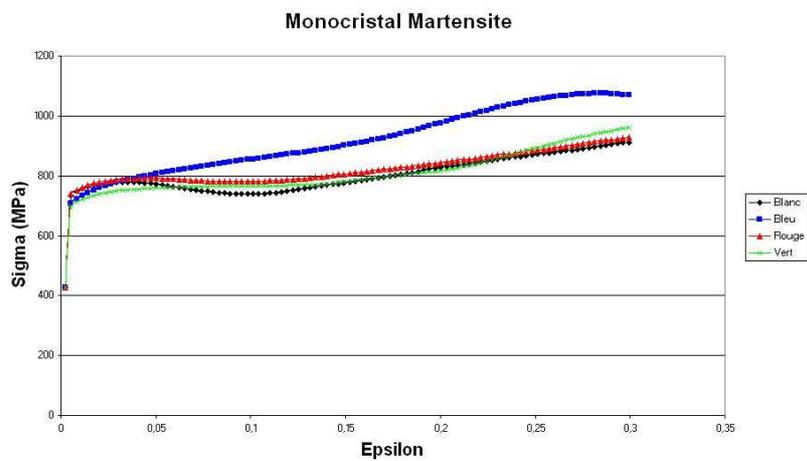


Figure IV-4 : Courbes  $\sigma$ -  $\epsilon$  pour les quatre orientations et les évolutions de celle-ci après 30% de déformation macroscopique (les points en couleur représentent l'état avant déformation).

Les orientations de bainite et de martensite ont globalement le même comportement à l'exception de la limite d'élasticité. Pour comprendre les mécanismes mis en jeu aux faibles déformations, les amplitudes des systèmes actifs et les densités de dislocations sur les systèmes actifs et latents ont été calculées, pour les orientations B et R.

Systèmes actifs et évolution des densités de dislocations dans la bainite et la martensite

Rappelons que le modèle, valable au dessus de la température critique, ne prend en compte qu'un durcissement de type forêt, avec une matrice d'écroissage  $a_{su}$  à deux termes. Les résultats sont présentés sur la figure IV 5 pour les orientations B et R.

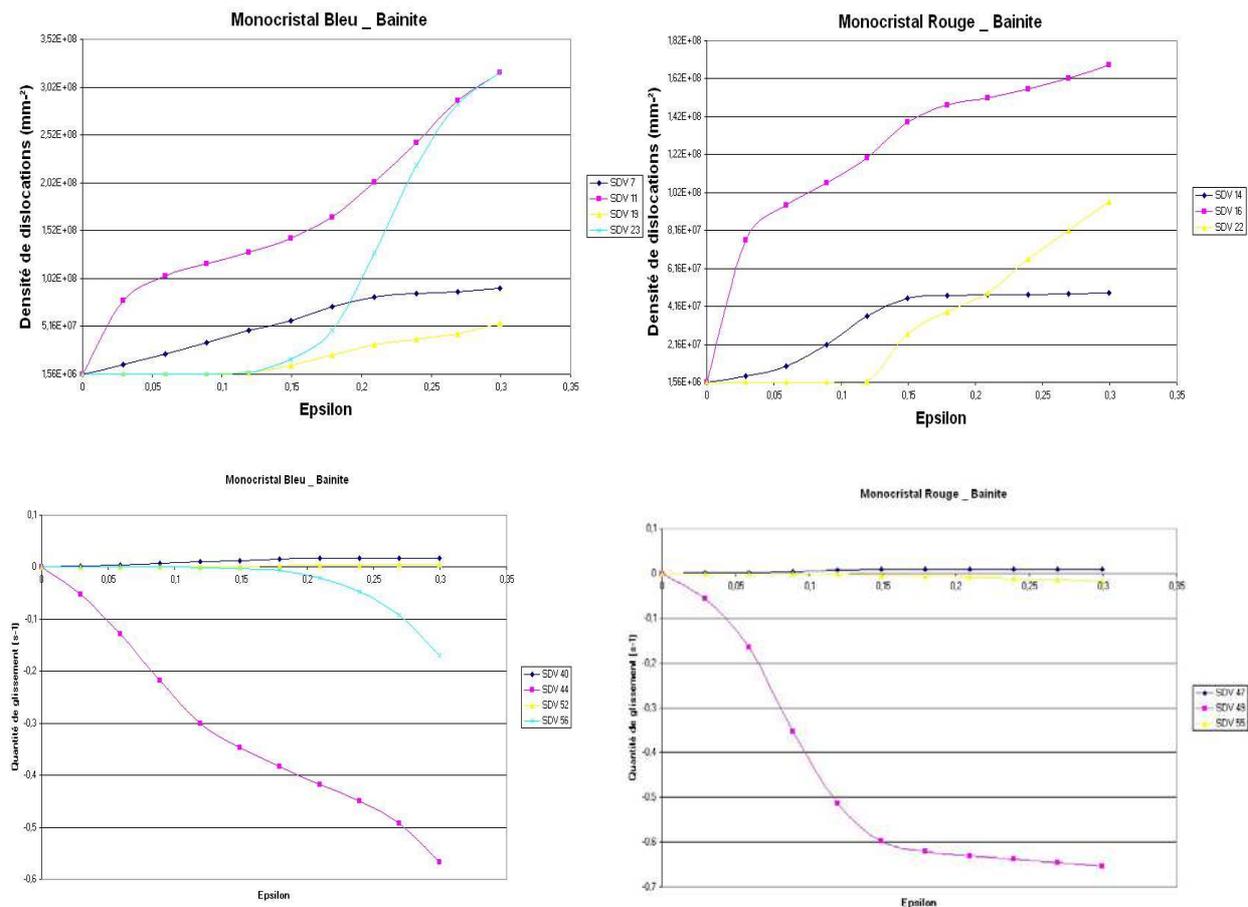


Figure IV-5 : Evolution des densités de dislocations et des amplitudes de glissement pour les Orientations de bainite B et R.

Orientation B : le système primaire de glissement est de la famille (SDV44) et transporte l'essentiel du glissement. Un deuxième système de glissement (SDV56) s'active vers 15% de déformation, ce qui explique le durcissement observé.

La densité de dislocations correspondant au système primaire SDV11, augmente de  $1,6 \cdot 10^6$  à  $3,5 \cdot 10^8 \text{ mm}^{-2}$  pour  $\epsilon = 30\%$ , tandis que la densité de dislocations sur le système secondaire augmente brutalement de  $1,6 \cdot 10^6 \text{ mm}^{-2}$  pour 10% de déformation à  $3 \cdot 10^8 \text{ mm}^{-2}$  pour 30%.

Orientation R : le système primaire de glissement est de la famille (SDV 49) et transporte l'essentiel du glissement, le système secondaire n'est pas activé, mais le système primaire sature vers 20% de déformation. La densité de dislocations correspondant au système primaire SDV16 augmente de  $1,6 \cdot 10^6$  à  $1,6 \cdot 10^8 \text{ mm}^{-2}$ . Le système secondaire augmente de  $1,6 \cdot 10^6 \text{ mm}^{-2}$  à  $10^8 \text{ mm}^{-2}$  mais ne participe pas à la déformation.

On note pour les deux orientations une augmentation de la densité de dislocations sur deux systèmes latents (SDV7) et (SDV14) qui saturent dès que la densité sur le système secondaire augmente.

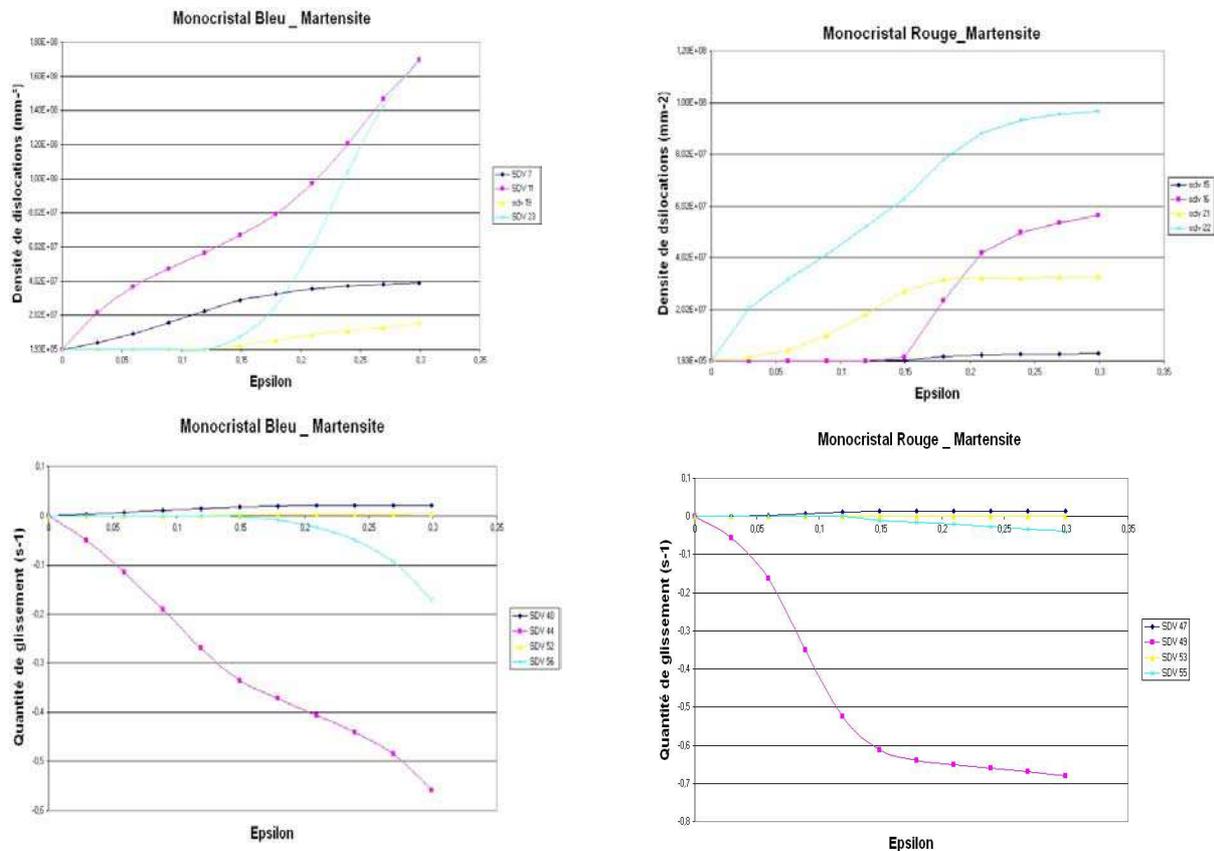


Figure IV-6 : Evolution des quantités de glissement et densités de dislocations pour les monocristaux de martensite bleu et rouge.

On retrouve pour la martensite et pour l'orientation Bleue, le même schéma que pour la bainite : activation du système primaire avec augmentation du durcissement.

Les mécanismes sont différents pour l'orientation Rose-Orange. On note, l'activation du système primaire puis saturation du glissement sur ce système, s'accompagnant d'un fort durcissement du système secondaire qui ne s'active pas.

## 2 Etude des conditions aux limites, influence d'une couche de milieu homogène équivalent

### 2-1 Bainite

Une simulation d'un agrégat de bainite de 300 x 80 μm<sup>2</sup> a été effectuée avec les coefficients identifiés sur des essais de traction. On notera BI1 l'agrégat de bainite formé d'une couche cristalline et BI1MHE, l'agrégat formé d'une couche cristalline et d'une couche de milieu homogène équivalent.

### Orientations de l'agrégat de bainite

Afin de simplifier le problème, les sous grains de désorientation inférieure à  $15^\circ$  n'ont pas été pris en compte. La figure IV-7 représente les orientations initiales de l'axe de traction, obtenues par EBSD.

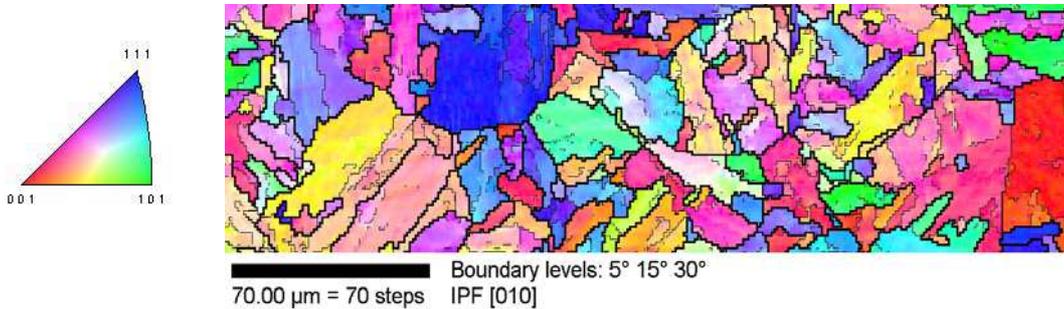


Figure IV-7 : Orientations initiales de l'axe de traction (DT) (EBSD).

### 2-1-1 Résultats de la simulation

#### Courbes de traction

On constate que les courbes de traction simulées sont légèrement différentes de la courbe expérimentale, dans le domaine des petites déformations (inférieures à 2%).

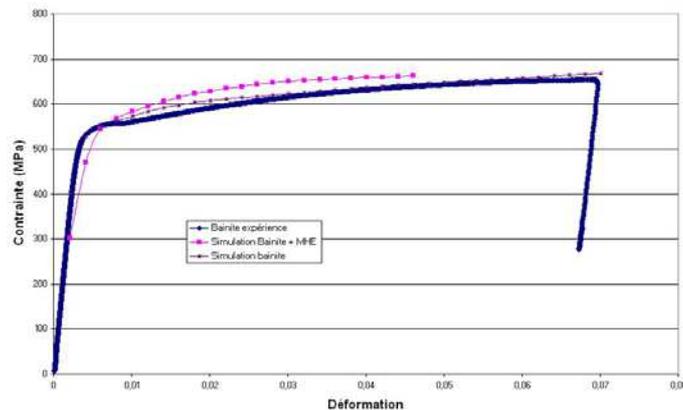


Figure IV-8 : Comparaison entre l'expérience et la simulation BII et BIIMHE.

#### Cartes d'orientation

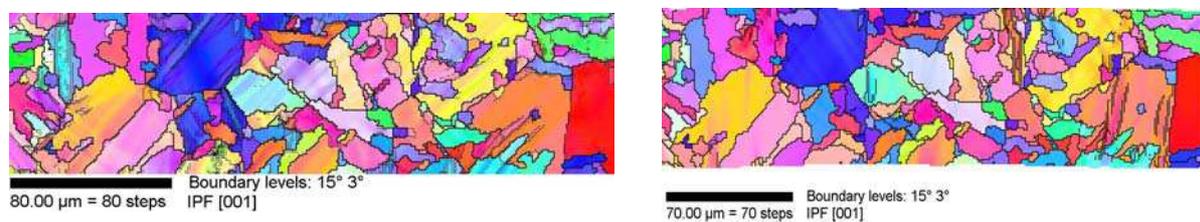


Figure IV-9 : bainite BI : Orientation cristalline pour  $e=8\%$ , sans MHE (gauche) et avec MHE (droite).

Cartes de déformation

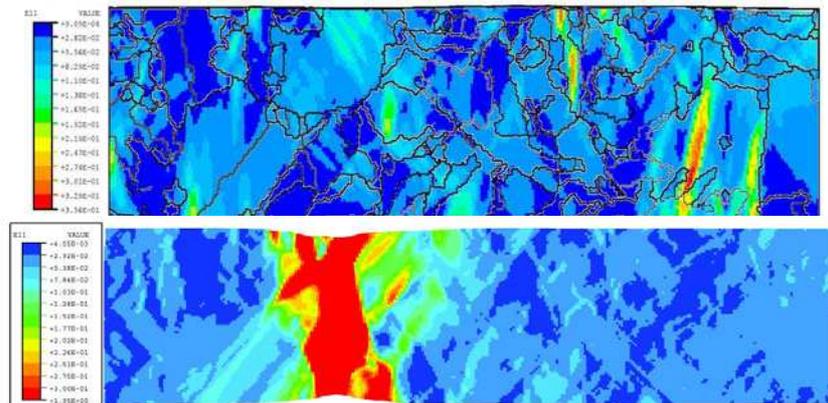


Figure IV-10 : Bainite II et Bainite IIMHE, carte de déformation E11 pour  $e=8\%$

Cartes de contraintes

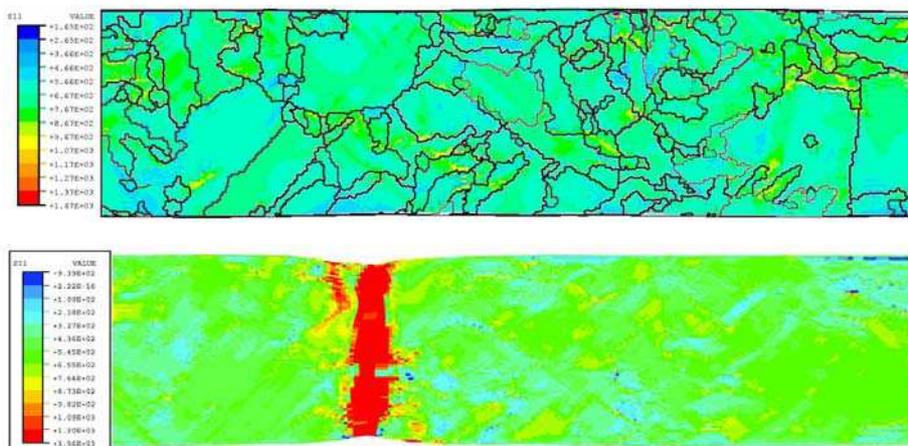


Figure IV-11 : Bainite II et BIIMHE : carte des contraintes S11 pour  $e=8\%$ .

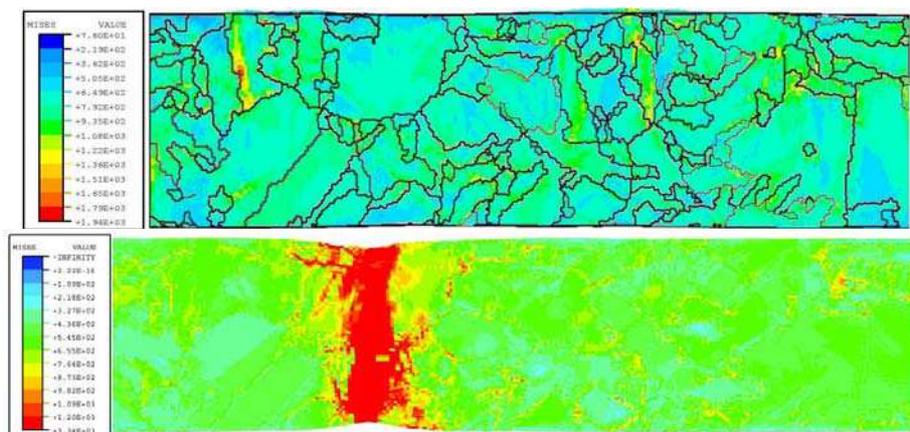


Figure IV-12 : Bainite II et BIIMHE : carte des contraintes équivalentes pour  $e=8\%$ .

## 2-1-2 Analyse des résultats

L'addition d'un MHE supprime la formation de sous joints induits par la déformation.

BI1 : L'examen de la carte à 8% de déformation, montre la formation de mésobandes à 45 degrés de l'axe de traction dans la configuration non déformée. Ces bandes de localisation sont généralement attribuées à un effet de structure (géométrie de l'éprouvette et conditions de l'essai mécanique). Une deuxième forme de localisation intragranulaire qui semble liée à l'orientation du grain et aux désorientations entre proches voisins, apparaît dans certains grains. Les bords libres favorisent ce type de localisation.

Une macrobande de localisation intense, correspondant à une striction diffuse, apparaît à 15% de déformation.

Les contraintes internes sont corrélées aux bandes de déformation intragranulaire et non aux bandes de structure. La figure IV11 montre que les contraintes sont voisines de  $720 \pm 200$ MPa.

BI1MHE :

L'addition du MHE fait disparaître la formation de sous-joints induits par la déformation, mais conduit à une localisation intense dès 8%, qui expérimentalement ne se produit qu'à 15%. L'étalement du pic de déformation (figure IV13a) vers les grandes déformations, correspond à la striction diffuse. La répartition spatiale des contraintes dans l'agrégat est modifiée de part et d'autre de la striction. En revanche la courbe de distribution des contraintes n'est pas fortement modifiée, bien que de fortes contraintes soient visibles dans la striction.

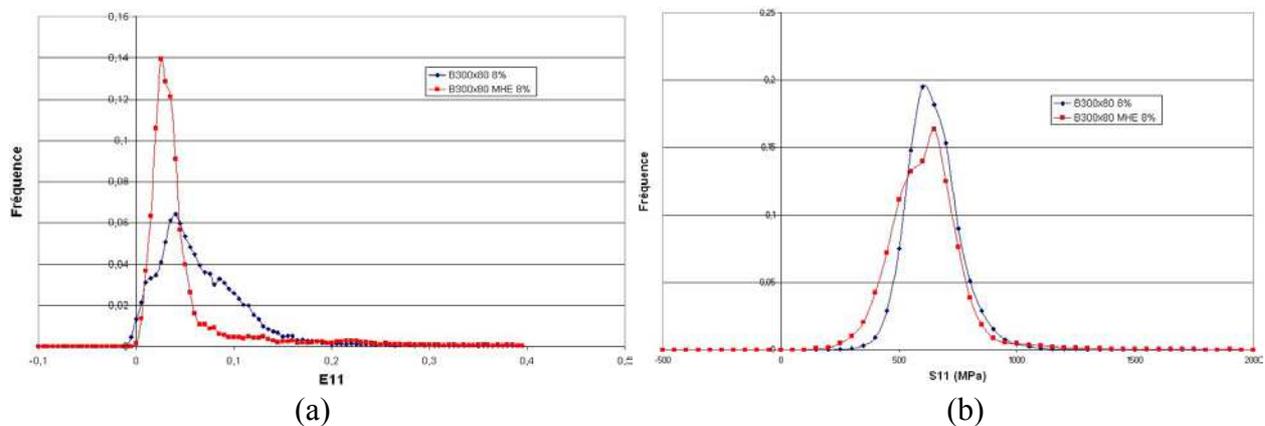


Figure IV-13a : Comparaison de la distribution de la composante  $E11$  avec et sans MHE

Figure IV-13b : Comparaison de la distribution de la composante  $S11$  avec et sans MHE

$$BI1 : \langle E11 \rangle = 7,57\%, \langle S11 \rangle = 720 \text{ MPa}$$

$$BI1MHE : \langle E11 \rangle = 7,01\%, \langle S11 \rangle = 692 \text{ MPa}$$

La contrainte équivalente au sens de von Mises, présente par rapport à  $S11$  des maxima concentrés aux joints de grains. Cette différence traduit un état de contrainte non uniaxial très localement.

Si l'addition d'une couche de MHE modifie considérablement la distribution des déformations, elle ne modifie pas notablement la distribution des contraintes internes.

## 2-2 Martensite

Soit MI1 l'agrégat constitué d'une couche de grains et MI1MHE l'agrégat avec une couche de milieu homogène équivalent.

Les dimensions des agrégats MI1 sont de  $150 \times 50 \times 0.5 \mu\text{m}^3$ . Les sous grains de désorientation inférieure à  $15^\circ$  n'ont pas été pris en compte.

### 2-2-1 Caractérisation de l'agrégat

Pour mieux analyser les résultats obtenus, on note A, B, C, D les quatre zones, correspondant probablement à d'anciens grains  $\gamma$ . La figure IV-14 représente les orientations initiales de l'axe de traction obtenues par EBSD et celles prises en compte dans la simulation. Les zones B et C sont constituées de paquets de lattes dont les orientations alternées sont en relation d'orientation KS. Les zones A et D sont plutôt isotropes.

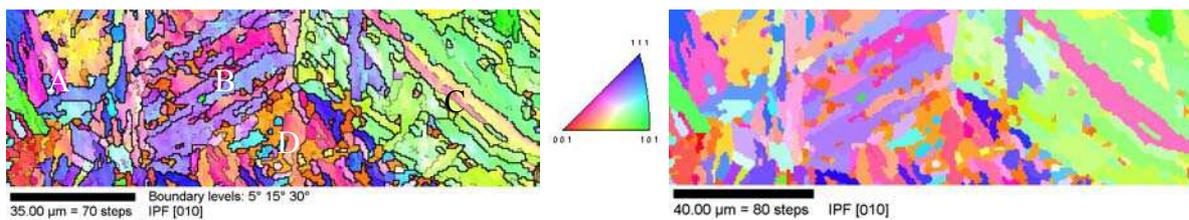


Figure IV-14 : Orientation de l'axe de traction (DT) obtenue par EBSD  
Orientations simplifiées, utilisées pour la simulation.

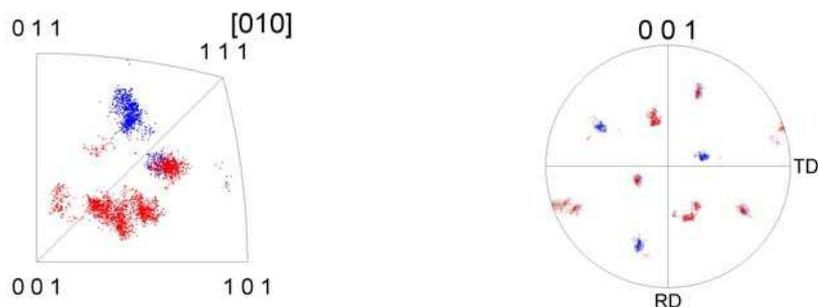


Figure IV-15 : Relations d'orientation des paquets de lattes de la zone B.

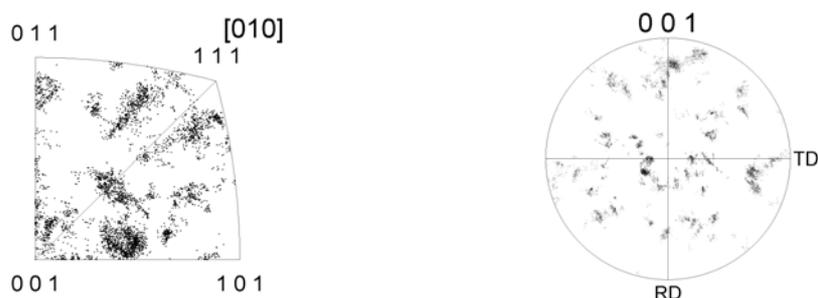


Figure IV-16 : Relations d'orientation des paquets de lattes de la zone A.

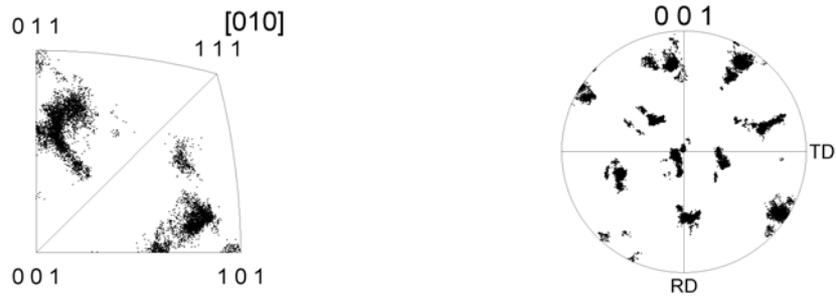


Figure IV-17 : Relations d'orientation des paquets de latte de la zone C.

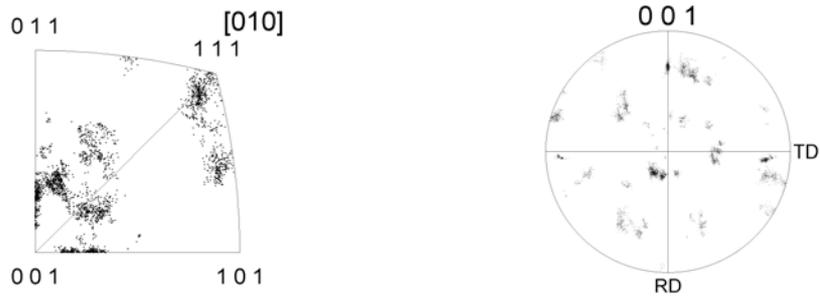


Figure IV-18 : Relations d'orientation des paquets de latte de la zone D.

### Courbes de traction

Les courbes simulées à partir de la microstructure réelle et des paramètres identifiés sont en bon accord avec la courbe expérimentale sauf au début de la déformation plastique. Comme pour la bainite, le MHE augmente les contraintes, sans modifier la pente d'écrouissage.

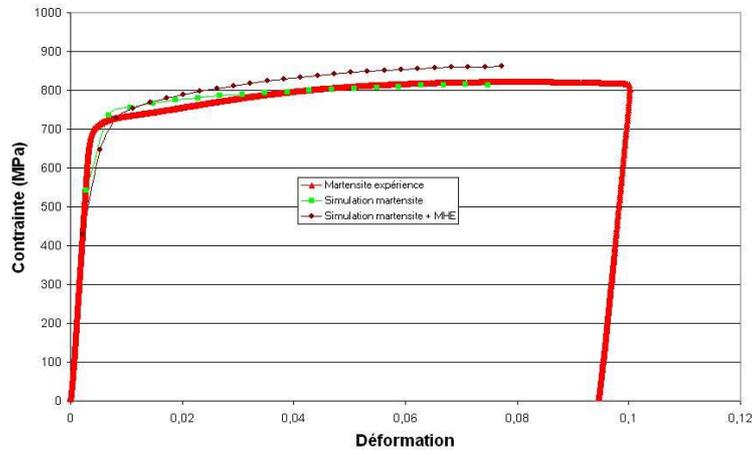


Figure IV-19 : Martensite II et IIMHE, courbes de traction expérimentale et simulées.

## 2-2-2 Résultats des simulations

### Cartes de déformation

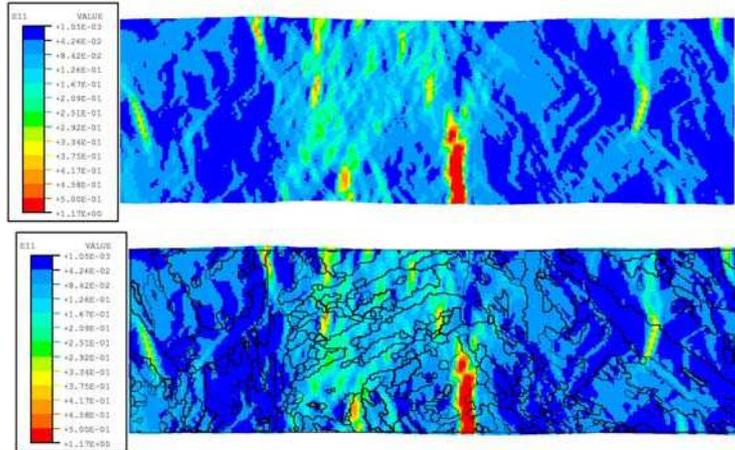


Figure IV-20 : Martensite II, carte de déformation  $E11$  pour  $e = 8\%$ .

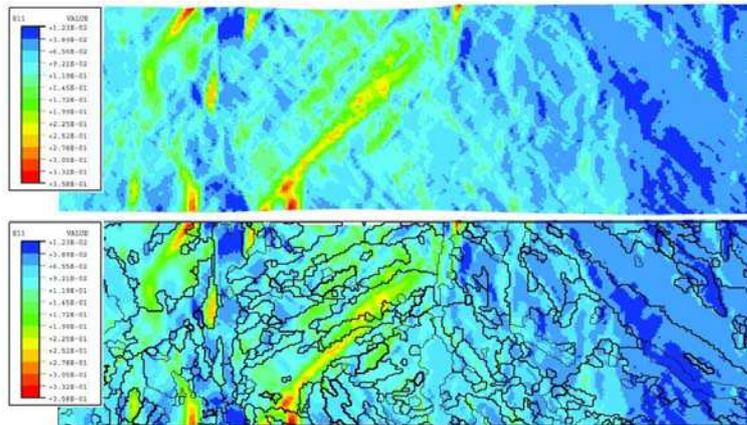


Figure IV-21 : Martensite II+MHE, carte de la composante  $E11$  pour  $e = 9\%$  (afin de mieux visualiser les déformations les cartes sont données avec et sans les joints de grains).

### Cartes de contraintes

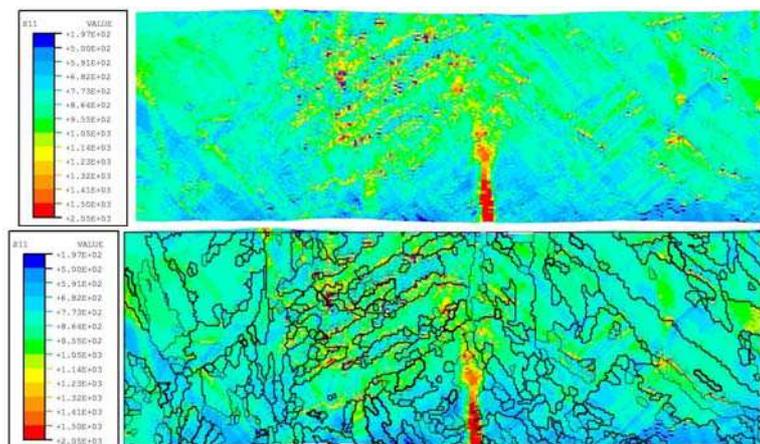


Figure IV-22 : Martensite II, carte des contraintes  $S11$  pour  $e = 8\%$ .

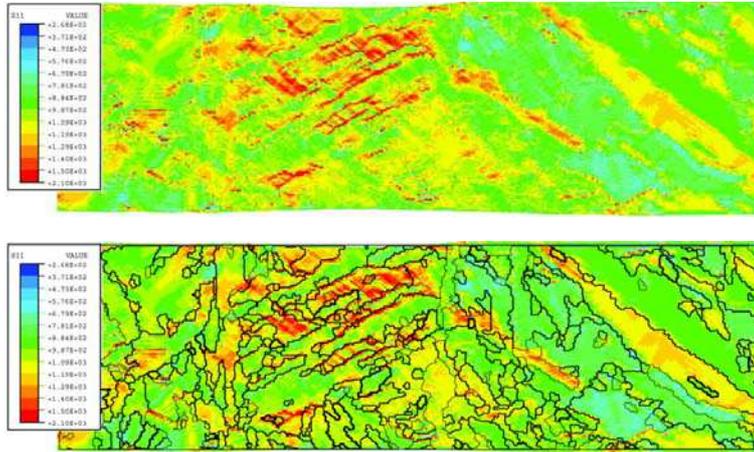


Figure IV-23 : *Martensite MIIMHE*, carte de la composante  $S_{11}$  pour  $e = 9\%$ .

### Rotation du réseau cristallin

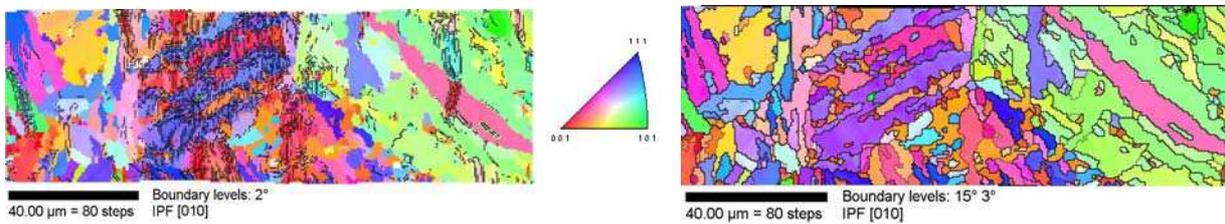


Figure IV-24 : *Martensite MII*, formation de sous-joints dans la zone B pour  $e = 8\%$ .

### Analyse des résultats

Le calcul de la texture locale met en évidence la formation de sous-joints faiblement désorientés pour une majorité d'orientations R et B, surtout dans la zone B.

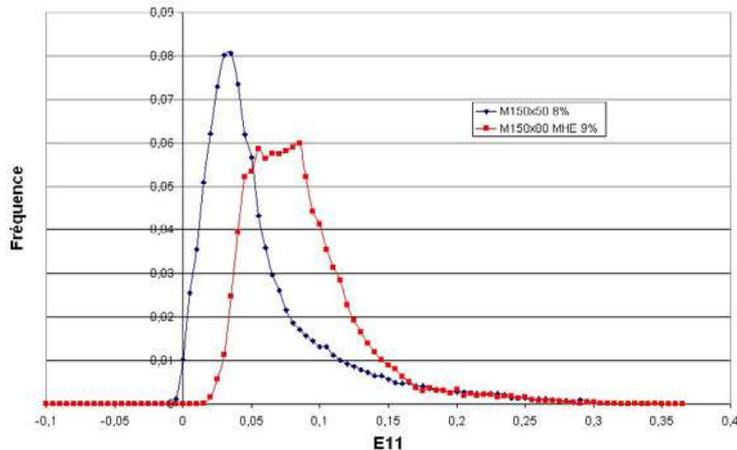


Figure IV-25 : *Martensite MII et MIIMHE*, histogramme de la composante  $E_{11}$ .

*MII* :  $e=8\%$ ,  $\langle E_{11} \rangle = 7,28\%$ .

*MIIMHE* :  $e=9\%$ ,  $\langle E_{11} \rangle = 8,45\%$ .

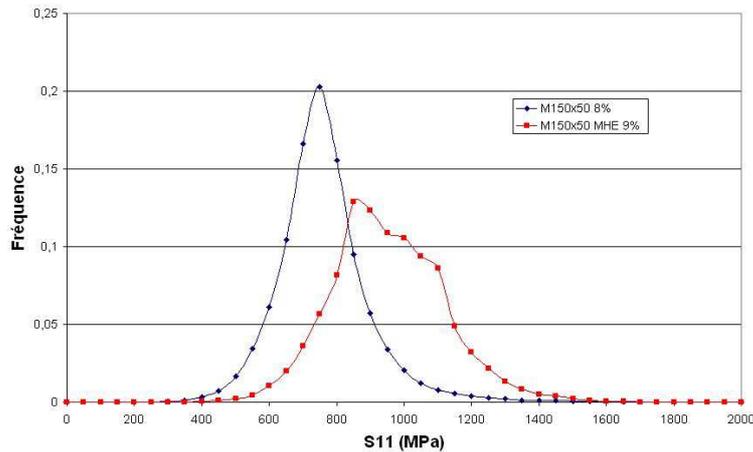


Figure IV-26 : Martensite MII et MIIMHE, histogramme de la composante S11.

*MI1* :  $e = 8\%$  ,  $\langle S11 \rangle = 836 \text{ MPa}$ .

*MIIMHE* :  $e = 9\%$  ,  $\langle S11 \rangle = 1027 \text{ MPa}$ .

Agrégat MI1 : Les cartes de déformation sont différentes de celles de la bainite, dans le sens où la microstructure fine de la martensite conduit à des bandes plus fines. Cependant, on retrouve une localisation en larges bandes dont les orientations sont proches de plans de cisaillement maximal dans la configuration non déformée et dans la zone B une localisation en bandes plus fines et plus désorientées, dues à la microstructure.

On distingue nettement dans la zone B, pour  $e=8\%$ , une localisation de la déformation de l'ordre de 16-20%. L'alternance de paquets de lattes « d'orientation » R et B correspond à une alternance de phases dures et molles. Si les joints de lattes sont des obstacles au glissement, la déformation se fait par une fragmentation des lattes en sous grains, fragmentation qui conduit à des contraintes internes fortes. L'activation de systèmes secondaires permettant la relaxation de ces contraintes est visiblement difficile du fait du faible libre parcours moyen entre les lattes.

La zone C présente un mélange de petits grains et de gros grains allongés. La grande différence de comportement comparé à la zone B, peut être attribuée à l'orientation de l'axe de traction, proche de [011] qui est un axe stable.

Les zones A et D, présentent une morphologie hétérogène, mélange de petits grains et de gros grains de formes diverses. Les orientations cristallines sont réparties de façon assez isotrope dans l'ensemble du triangle stéréographique standard. Les hétérogénéités sont faibles.

La contrainte moyenne calculée est de 838MPa. Les contraintes appartiennent à l'intervalle  $838 \pm 150 \text{ MPa}$ . Les fortes contraintes (1000MPa) sont situées aux joints de lattes B/R. De fortes contraintes intragranulaires (1500MPa), sont calculées dans le grain R en bord d'éprouvette (points singuliers dus à la fois à des effets de bord et d'orientation).

Agrégat MIIMHE : La présence du MHE, homogénéise la déformation. La zone critique B subsiste, avec une déformation moyenne des grains R de 20-25% pour  $e=9\%$ .

Les histogrammes des déformations avec et sans MHE sont décalés de 2% ce qui correspond à la différence de déformation moyenne calculée sur E11. Contrairement au cas de la bainite, l'addition d'un MHE tend à augmenter les hétérogénéités (élargissement du pic) et la courbe

est plus plate. En revanche, les valeurs des maxima et la proportion d'éléments de fortes déformations, sont identiques avec et sans MHE (fin de courbes confondues).

Les histogrammes correspondant à S11 sont décalés, les contraintes internes sont plus fortes en présence de MHE. La contrainte moyenne calculée est de 1027MPa. Ce résultat peut s'expliquer, par la génération de contraintes internes intergranulaires principalement aux interfaces MHE/orientation R. Cette observation conforte l'idée que les tailles de lattes sont des paramètres importants. Notons que les contraintes sont maximales dans la zone critique B et les grains d'orientation R (phase molle) sont les plus chargés. Ceci peut provenir du comportement identique du MHE et de l'orientation B (phase dure).

L'existence de fortes contraintes aux interfaces est un phénomène classique quand les grains voisins sont très incompatibles et/ou si diverses conditions (orientation, taille des grains) rend un grain très «dur», ne permettant pas l'activation d'un nombre suffisant de systèmes de glissement.

La portée des contraintes internes dans l'agrégat MI1, est inférieure ou égale à la taille d'une maille (0,5µm). Dans le cas de l'agrégat MI1MHE, les épaisseurs des couches de grains et du MHE étant de 0,5µm chacune, les contraintes intragranulaires dans ce dernier sont le résultat d'incompatibilités entre les orientations R et le MHE.

La comparaison des cartes S11 et des contraintes équivalentes, montre que la contrainte dans les paquets de lattes n'est pas uniaxiale.

Les cartes des autres composantes sont reportées en annexe, notons que les contraintes de cisaillement sont faibles

**Conclusion des paragraphes 2-1 et 2-2 :** La grande différence entre la bainite et la martensite ne se situe pas au niveau des lois de comportement utilisées, mais au niveau de la morphologie et des orientations de la microstructure. Dans la martensite, les entités cristallographiques sont des «lamelles», regroupées en paquets 5 à 10µm, présentant des relations d'orientation.

La simulation met en évidence dans la martensite avec ou sans MHE, l'existence d'une zone "critique" du point de vue des contraintes. Cette zone est caractérisée par une morphologie en fines lattes et trois orientations principales, la nature des joints de grain mériterait d'être précisée, mais il s'agit probablement des joints de flexion (axe [112], 60°).

L'addition d'une couche de MHE modifie différemment le comportement local dans la bainite et la martensite. Ce point sera discuté dans le chapitre suivant.

*La simulation de l'agrégat de martensite a mis en évidence une zone "critique" caractérisée par une morphologie alternée en fines lattes d'orientations différentes où les déformations et les contraintes sont élevées. Dans la bainite, les contraintes sont relaxées dans les bandes de déformation intragranulaires. Elles ne subsistent qu'au niveau des interfaces et dans la matrice. Ces constatations nous ont conduit à étudier plus en détail le rôle de la morphologie et des orientations.*

### 3 ROLE DE LA MICROSTRUCTURE

Une simulation d'un l'agrégat virtuel de martensite a été réalisée à partir de l'agrégat réel.

#### 3-1 Morphologie identique - orientation des lattes aléatoires

Les orientations dans l'ex-zone B, dite critique, ont été modifiées, mais la morphologie en lattes a été conservée. La figure IV- 27 donne la cartographie des orientations utilisées pour cette simulation.

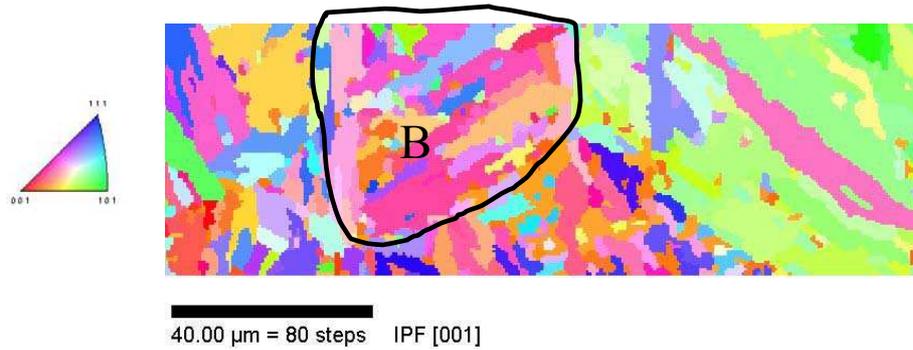


Figure IV-27 : Agrégat à morphologie identique et à orientations aléatoires

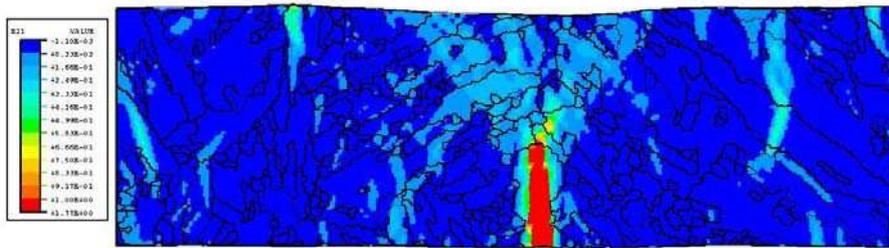


Figure IV-28 : Carte des déformation  $E_{11}$  à 8% d'élongation macroscopique.

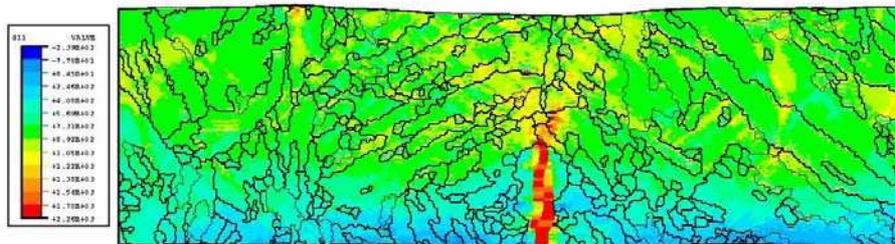


Figure IV-29 : Carte des contraintes  $S_{11}$  à 8% d'élongation macroscopique.

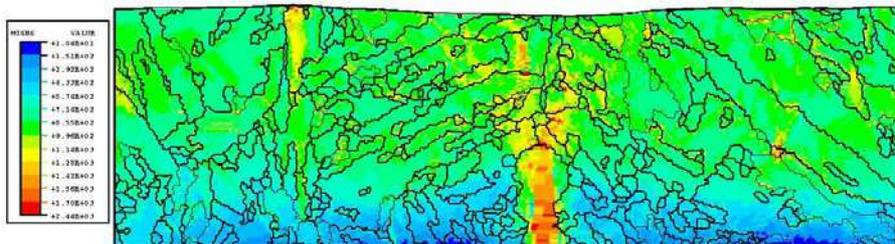


Figure IV-30 : Carte des contraintes de von Mises à 8% d'élongation macroscopique.

On constate que la déformation est globalement plus homogène dans la zone critique, lorsque la distribution des orientations est aléatoire. L'orientation R n'a plus le même effet lorsqu'elle n'est pas adjacente à l'orientation B.

Les contraintes sont localisées dans les grains et non plus au joint de grain, elles sont le résultat de la forte déformation du grain de la zone D.

Les champs mécaniques dans les autres entités A, C, D et E sont peu modifiés. Cela signifie que la portée des contraintes internes est très inférieure à la taille de l'ex grain austénitique. La localisation intense du grain rouge de la zone D induit une déformation du type «pointe de fissure» dans la zone B.

### 3-2 Morphologie modifiée et orientations inchangées

Les lattes de la zone B sont remplacées par deux grains avec un joint de grain ayant l'orientation des joints de latte R/B.

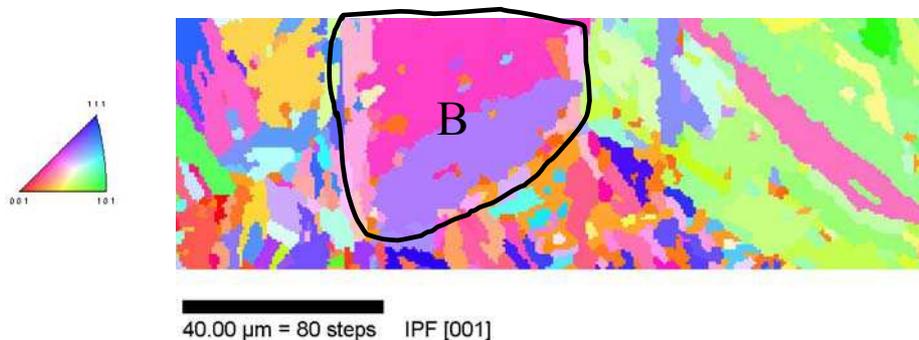


Figure VI-31 : Agrégat à morphologie modifiée et à orientations conservées.

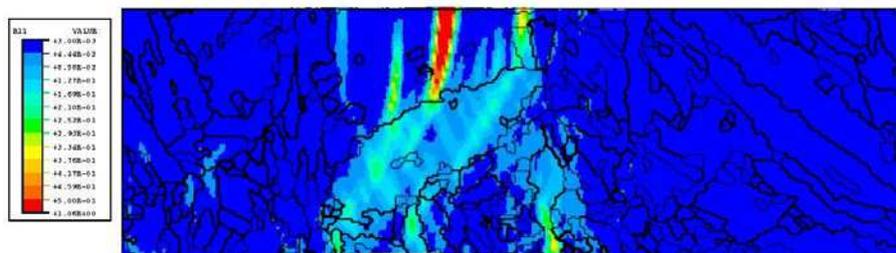


Figure IV-32 : Carte des déformation  $E_{11}$  à 8% d'élongation macroscopique.

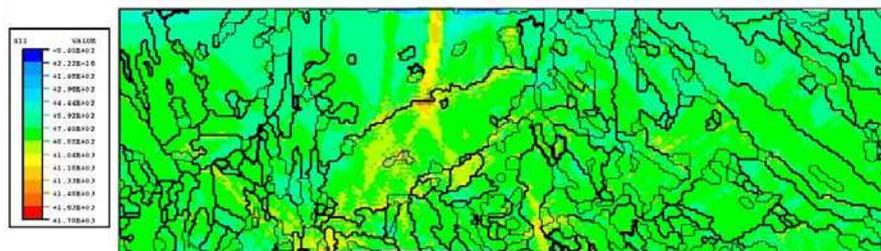


Figure IV-33 : Carte des contraintes  $S_{11}$  à 8% d'élongation macroscopique

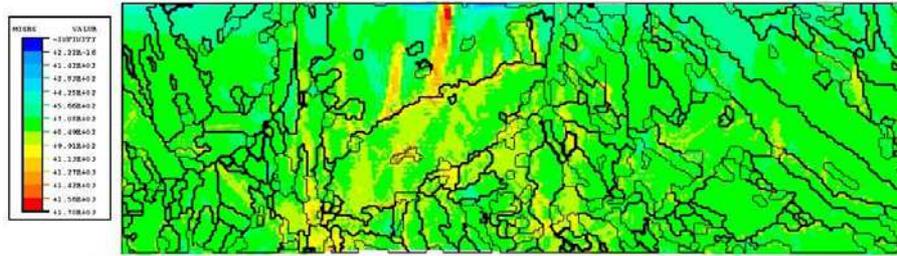


Figure IV-34 : Carte des contraintes de von Mises à 8% d'élongation macroscopique.

La déformation se localise dans le grain central B et de fortes déformations en bandes apparaissent dans le grain R. Ces bandes s'accompagnent de fortes contraintes. Il est impossible de déterminer laquelle des deux orientations se déforme en premier, mais la répartition des champs mécaniques est différente de celle simulée dans la martensite réelle.

*Remarque* : Les interactions d'une part entre les grains et d'autre part, entre les grains et le MHE ne sont pas sans conséquence sur le comportement local. Afin de mieux analyser ce problème, les champs de contrainte dans les grains de bicristaux d'orientation R/B et B/R, constitués de 4 couches d'éléments et de 4 couches + un MHE ont été simulés dans l'annexe V. Les résultats montrent que :

- L'orientation des vecteurs de Burgers par rapport au joint de grains et aux surfaces libres peut modifier la réponse en contrainte [RZ80]. En effet on obtient des résultats différents selon les bicristaux R/B ou B/R.
- Le MHE n'a d'effet que sur les deux premières couches d'éléments. A partir de la troisième couche ce sont les interactions entre grains qui prédominent et on retrouve des résultats identiques aux bicristaux sans MHE, constitués de 4 couches d'éléments.

*Synthèse* : les comportements mécaniques identifiés de la martensite et de la bainite à l'exception de la limite d'élasticité sont très proches. Si dans les deux matériaux les champs mécaniques locaux sont hétérogènes, les répartitions spatiales des contraintes sont différentes. Ces différences ne correspondent pas à un simple effet de similitude lié à la différence de taille des entités cristallographiques. On peut faire l'hypothèse que la faible taille des paquets de lattes dans la martensite ne permet pas la même relaxation des contraintes que dans la bainite. Les résultats des simulations montrent que la portée des contraintes internes est faible, inférieure à  $1\mu\text{m}$  voire à  $0,5\mu\text{m}$ . La réponse des lattes de martensite est donc différente de celle des entités cristallographiques constituant la bainite et l'orientation joue un rôle non négligeable dans le premier cas. L'effet du MHE, qui traduit le comportement moyen d'une couche de grains, modifie la répartition spatiale des champs mécaniques, diminue les hétérogénéités de déformation, sans modifier notablement l'amplitude et les histogrammes de contraintes.

Afin de mieux analyser la signification des simulations avec et sans MHE, les deux agrégats étudiés dans le chapitre III, sont simulés de nouveau avec un MHE et les résultats comparés à l'expérience.

# CHAPITRE V

## PRISE EN COMPTE D'UNE COUCHE DE GRAINS SOUS LA FORME D'UN MILIEU HOMOGENE EQUIVALENT. CHAMPS MECANIQUES LOCAUX ET ENDOMMAGEMENT

Ce chapitre concerne l'influence d'un milieu homogène équivalent (MHE) en sous couche, sur les hétérogénéités des champs mécaniques des agrégats B et M du chapitre III. Le comportement du milieu homogène équivalent, a été identifié pour chaque microstructure, sur la réponse macroscopique des deux matériaux à un essai de traction simple. Pour la bainite, la zone simulée est de  $600 \times 200 \mu\text{m}^2$  et pour la martensite de  $300 \times 100 \mu\text{m}^2$ . Dans les deux cas, une couche de milieu homogène équivalent a été ajoutée, afin de simuler l'effet d'une couche inférieure de grains. Les maillages sont constitués respectivement de  $600 \times 200 \times 2$  et de  $300 \times 100 \times 2$  éléments cubiques à interpolation linéaire et intégration réduite.

### 1 SIMULATION DE LA BAINITE

La taille des calculs n'a pas permis, pour les agrégats avec MHE, de dépasser une déformation  $e=7,5\%$

#### 1-1 Comparaison des résultats expérimentaux et calculés pour la bainite B avec MHE

##### Orientations

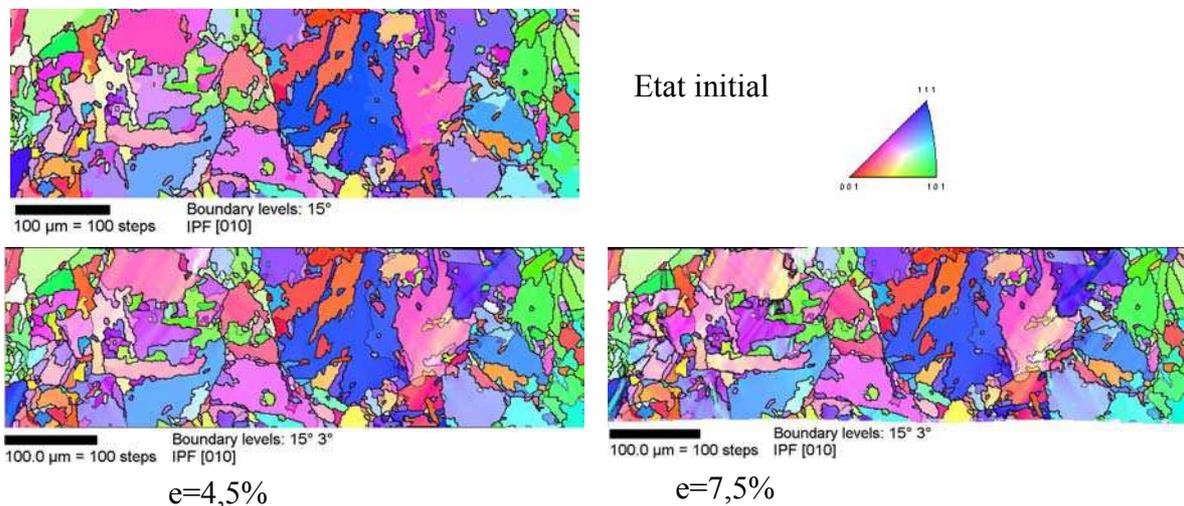


Figure V-1 : Cartes des orientations de l'axe de traction  $e=0\%$ ,  $4,5\%$  et  $e=7,5\%$ .

## Déformation

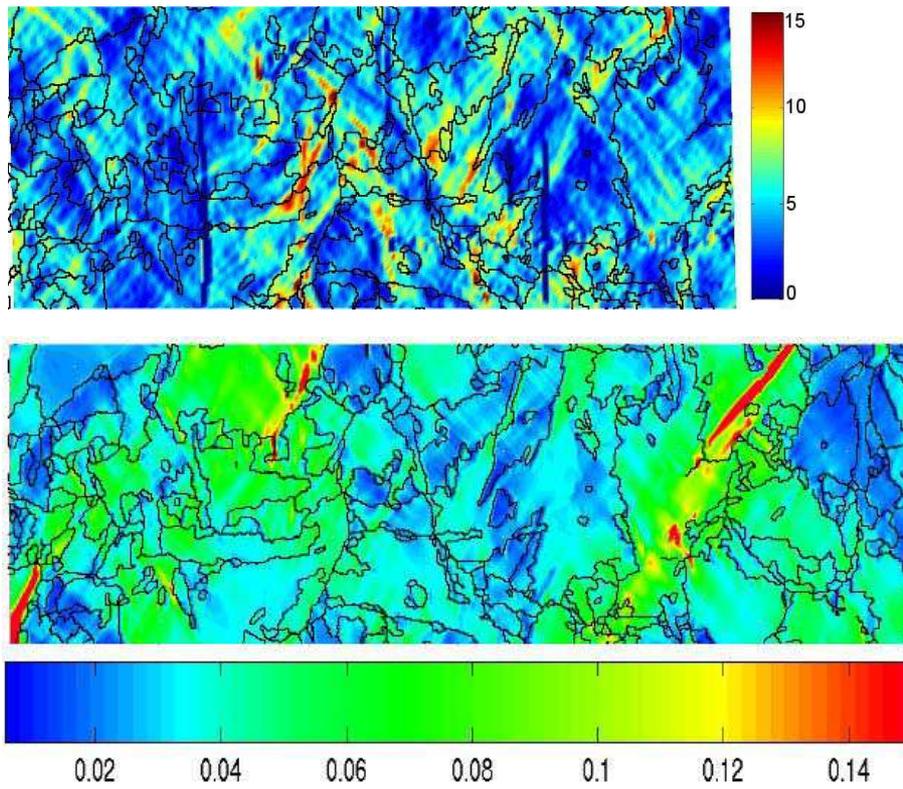


Figure V-2 : Carte  $E_{11}$  expérimentale (haut) et simulée (bas) pour  $e= 4,5\%$   
Les valeurs de  $E_{11}$  sont représentées dans la configuration non déformée.

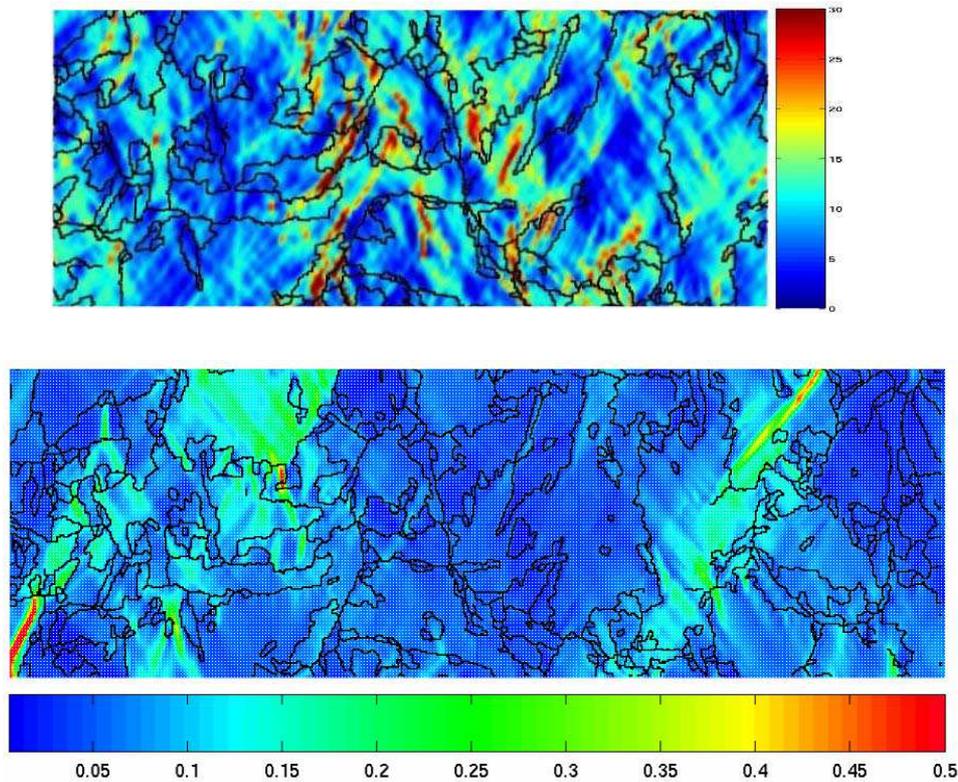


Figure V-3 : Carte  $E_{11}$  expérimentale pour  $e= 10\%$  et carte simulée pour  $e=7,5\%$ .

## Contraintes

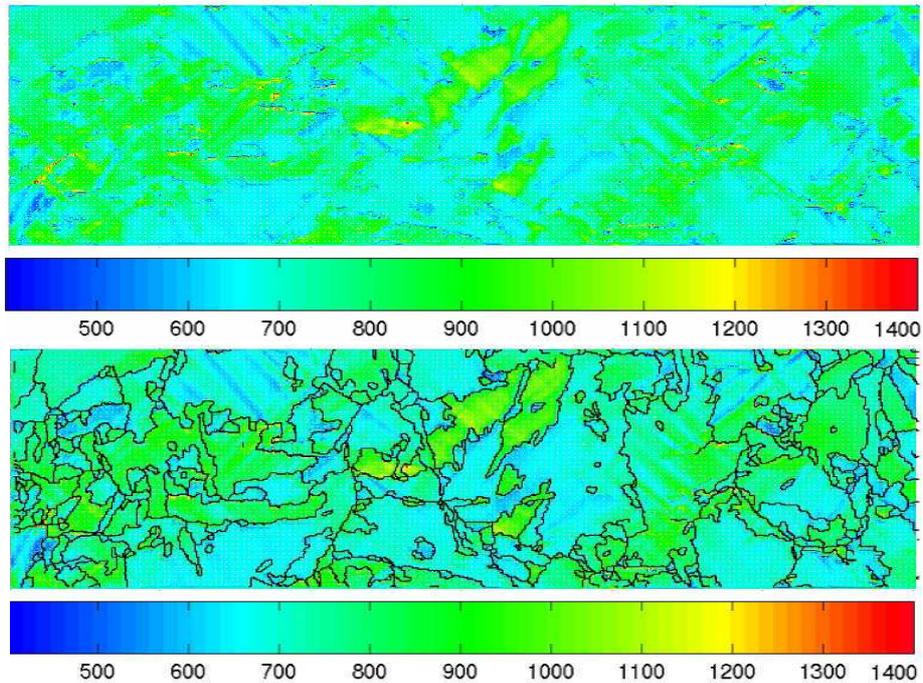


Figure V-4 : Carte de la composante  $S_{11}$ , pour  $e=4,5\%$ .

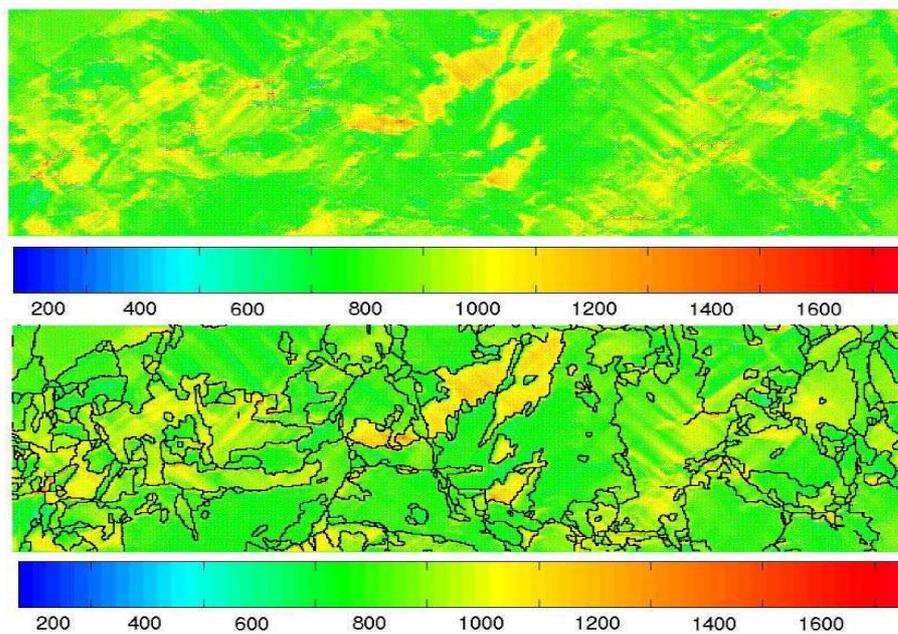


Figure V-5 : Carte de la composante  $S_{11}$ , pour  $e=7,5\%$

Valeur moyenne calculée  $\langle S_{11} \rangle = 804 \text{ MPa}$

## Discussion

Les résultats numériques et expérimentaux divergent notablement.

L'addition d'un MHE à l'agrégat de bainite, tend à homogénéiser la déformation. Les fortes déformations au niveau des interfaces ont disparu (figure III-14). Les maxima de déformation sont situés dans les grains traversés par de larges bandes de déformation intergranulaires, liées à l'effet de structure. Dans ces bandes, une localisation intragranulaire est visible. Les contraintes sont maximales entre ces bandes intragranulaires. Elles se situent

préférentiellement dans les entités cristallographiques de couleurs ‘Rose-Orange’, c'est-à-dire pour des orientations de l'axe de traction au voisinage de [001], lorsque que les orientations voisines sont proches de l'orientation bleue [111]. Notons sur les cartes de contraintes, que les grains d'orientation Bleue ne subissent pas de contraintes, cette orientation est « dure » et son comportement est proche de celui du MHE.

La texture locale à 7,5% ne met pas en évidence de fortes variations d'orientation, contrairement au cas de l'agrégat de bainite sans MHE. Notons toutefois, la formation de sous-joints de désorientation inférieure à 3 degrés (visibles par une légère variation de couleur) dans les grains de taille élevée. Ces bandes de rotation correspondent aux bandes de forte déformation, mais la rotation est très limitée par le MHE.

Examinons de façon plus globale, le rôle du MHE.

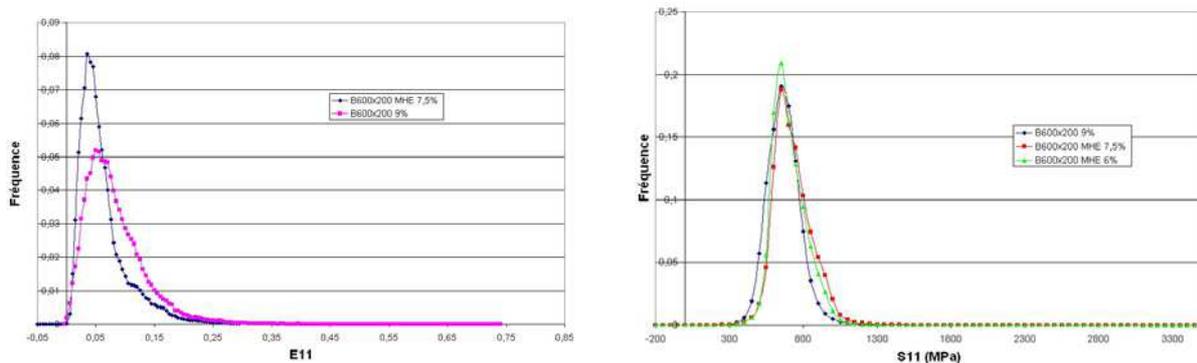


Figure V-6 : Histogrammes de  $E_{11}$  et  $S_{11}$  correspondant aux bainites B et BMHE

Sur l'histogramme, sont comparées les courbes  $E_{11}$  de la bainite B pour  $\langle E_{11} \rangle = 8,4\%$  et de la bainite BMHE pour  $\langle E_{11} \rangle = 7,08\%$ . La différence des déformations moyennes ne justifie pas la différence présentée par les courbes de la bainite B et BMHE. On en conclut que le MHE diminue les hétérogénéités de déformation.

Les valeurs moyennes de  $E_{11}$  et  $S_{11}$  sont :

bainite B :  $e = 9\%$ ,  $\langle E_{11} \rangle = 8,4\%$ ,  $\langle S_{11} \rangle = 743$  MPa

bainite BMHE  $e = 7,5\%$ ,  $\langle E_{11} \rangle = 7,1\%$ ,  $\langle S_{11} \rangle = 803$  MPa

$e = 6\%$ ,  $\langle E_{11} \rangle = 5,7\%$ ,  $\langle S_{11} \rangle = 693$  MPa

Si l'addition du MHE diminue l'intervalle de déformation donc des hétérogénéités, elle ne modifie pas de façon significative, la répartition des contraintes, les maxima sont dans les trois cas de l'ordre de 1200 MPa. En revanche, l'addition du MHE augmente la valeur moyenne des contraintes par rapport à la contrainte macroscopique  $\langle S_{11} \rangle$ . On peut émettre l'hypothèse que les effets des incompatibilités entre les interfaces d'entités cristallographiques sont atténués, alors qu'ils sont exacerbés entre le MHE et la couche d'agrégat.

## 2 SIMULATION DE LA MARTENSITE

Nous avons comparé la carte simulée à la micrographie au MEB pour une elongation à 8%. Dans la planche V-8, sont données, dans la configuration non déformée, l'orientation simulée de l'agrégat, la carte de la composante de déformation  $E_{11}$ , la carte de la contrainte  $S_{11}$  pour

des élongations  $e=4,5\%$  et  $e=7,5\%$  et la carte de la composante E33 pour une élongation  $e=7,5\%$ .

**Orientation**

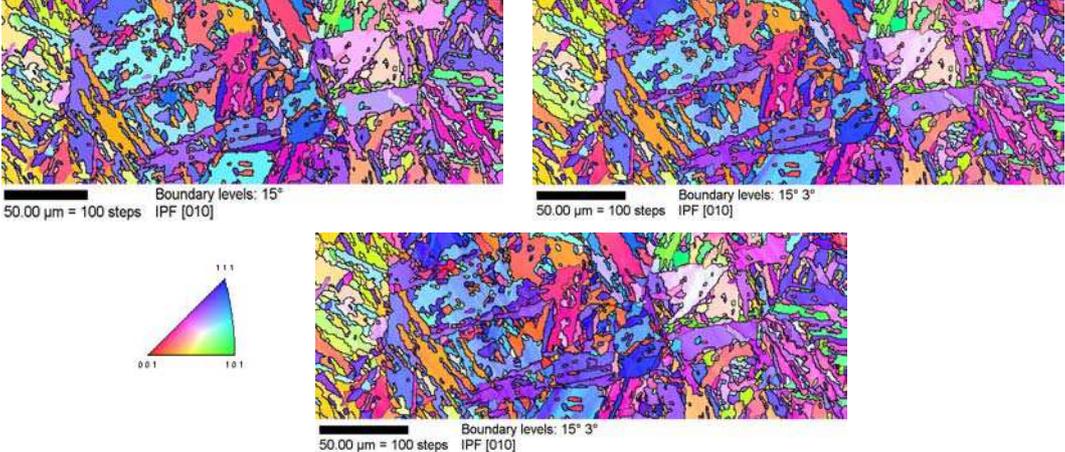


Figure V-7 a : Orientation de l'axe de traction  $e=0\%$ ,  $e= 4,5\%$  et  $e= 7,5\%$

**Déformation**

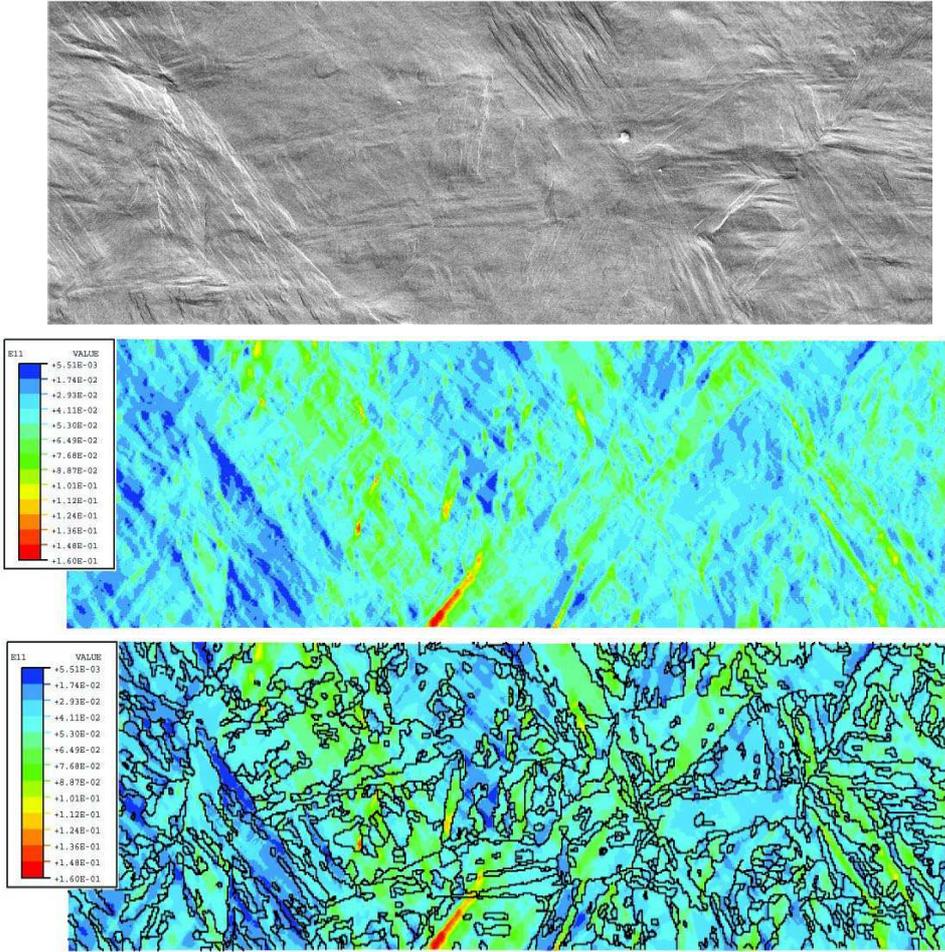


Figure V-7 b : Carte de la composante de déformation E11 pour  $e= 4,5\%$  et MEB en haut.

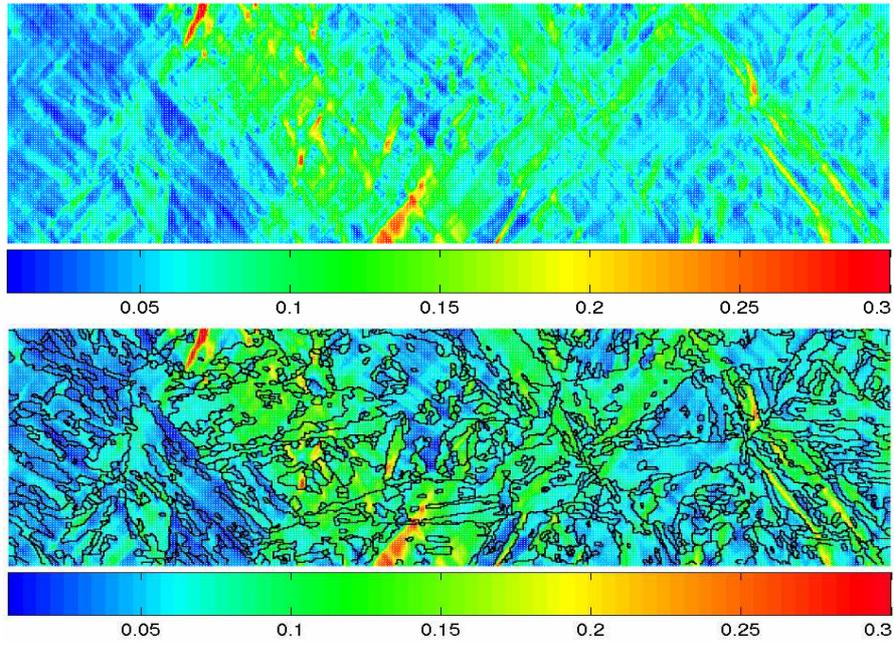
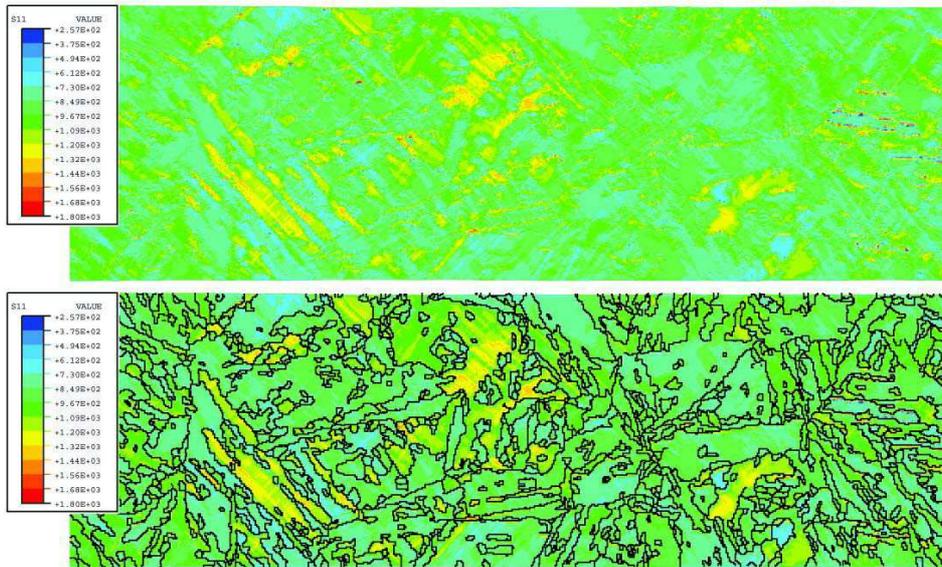
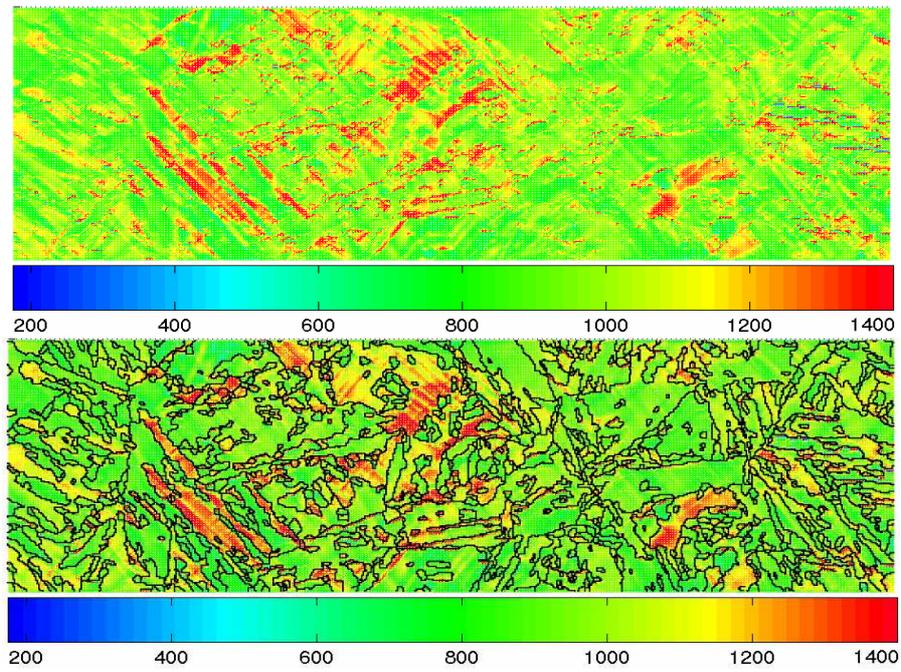


Figure V-7 c : Carte de la composante de déformation  $E_{11}$  pour  $e=7,5\%$ .  
La déformation moyenne calculée est de  $\langle E_{11} \rangle = 7,14\%$

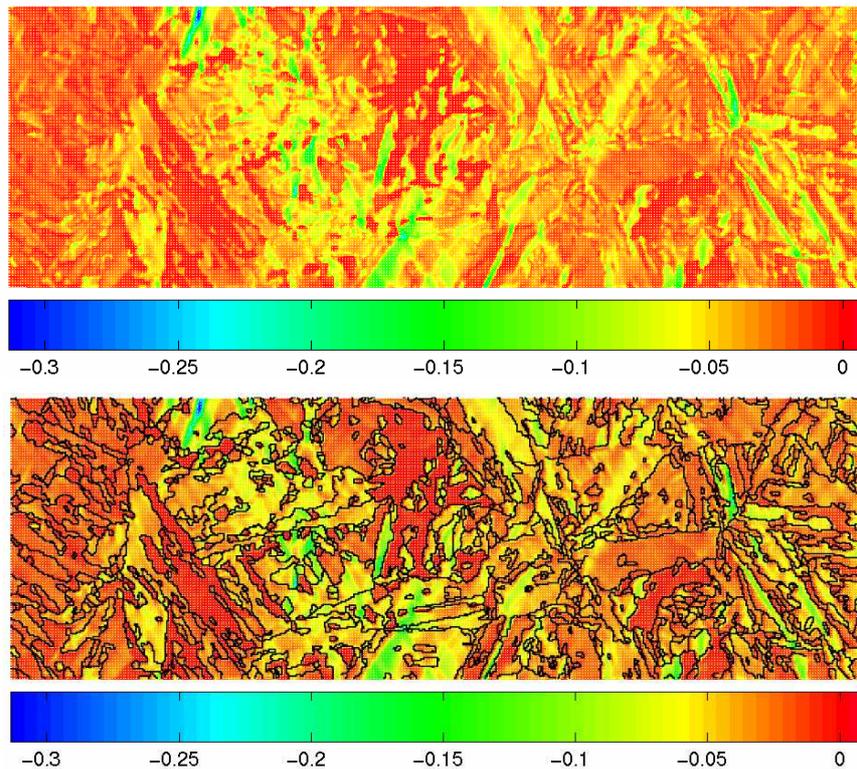
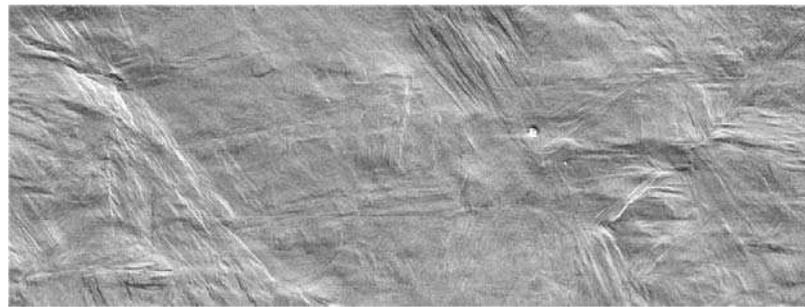
### Contraintes



Figures V-7 d: Composante  $S_{11}$  pour une élongation de 4,5%.



Figures V-7 e : Composante  $S_{11}$  pour  $e=7,5\%$ .



Figures V-7 f : Composante  $E_{33}$  pour  $e=7,5\%$  et MEB en haut.

## Discussion

### *Texture locale :*

La texture locale à 4,5% comme à 7,5% ne met pas en évidence de fortes variations d'orientation, notons toute fois, la formation de sous joints (visibles par une légère variation de couleur) dans les grains de taille élevée. Ces bandes de rotation correspondent aux bandes de déformation.

### *Champs de déformation et de contrainte*

La simulation du relief donné par E33 est en assez bon accord avec la micrographie de la zone simulée. Le relief correspond à un changement de couleur. Les paquets de lattes orientés à environ 45 degrés de l'axe de traction se détachent nettement. On note que les joints de lattes sont stables et que les lattes se creusent.

Pour une elongation  $\epsilon=4,5\%$ , on observe déjà l'apparition de bandes de déformation E11, correspondant aux lattes, alternant maxima et minima, orientées à 40-45° de l'axe de sollicitation.

Pour  $\epsilon=7,5\%$ , l'alternance en bandes de localisation s'accroît avec des minima de l'ordre de 5% et des maxima de 15%. L'addition d'un MHE a permis de mieux répartir la déformation et de retarder la localisation intense pour les orientations 'Rose-Orange'.

Les cartes de contraintes S11 présentent des minima où la déformation est la plus importante, mais présentent aussi des maxima qui sont plutôt inter-lattes. Les grains d'orientations 'Rose-Orange', sont très contraints. Il est probable, là encore, que ces contraintes viennent des incompatibilités avec le MHE. Les grains d'orientation 'Bleue' qui ont un comportement proche du MHE, ne sont pas contraints.

Les histogrammes de déformation avec et sans MHE sont peu différents, alors que ceux des contraintes se distinguent nettement. Cette différence peut provenir de la localisation diffuse qui se produit en l'absence de MHE, mais aussi de la présence du MHE qui traduit l'effet moyen d'une deuxième couche de grains.

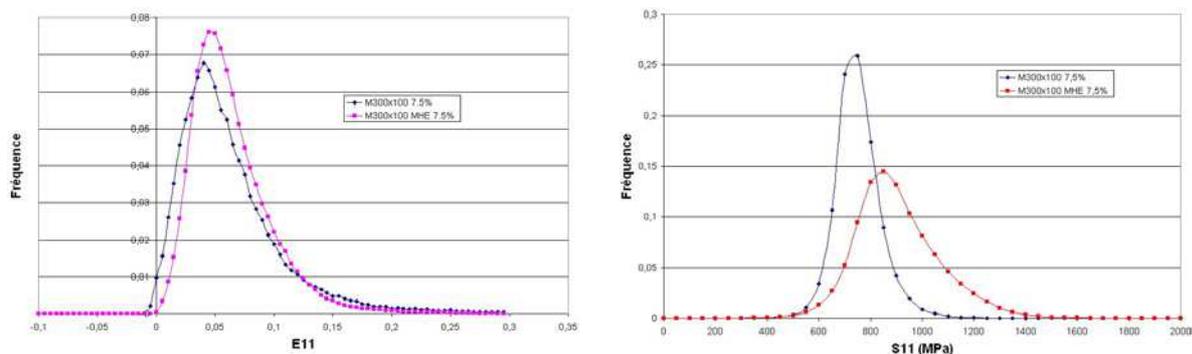


Figure V-8 : *Histogramme des composantes E11 et S11 pour la martensite respectivement avec et sans MHE.*

Valeurs moyennes calculées pour la martensite :

M :  $\langle E11 \rangle = 7,1\%$  et  $\langle S11 \rangle = 826 \text{ MPa}$

MMHE :  $\langle E11 \rangle = 7,14\%$  et  $\langle S11 \rangle = 978 \text{ MPa}$

Les histogrammes des déformations avec et sans MHE sont semblables, bien que la répartition spatiale des déformations diffère notablement dans les deux cas. Ceci traduit l'importance de la microstructure fine de la martensite sur le comportement.

### 3 SYNTHÈSE DES RESULTATS – DISCUSSION

La simulation avec un milieu homogène équivalent (MHE) améliore la prédiction du comportement de la martensite, en diminuant la déformation dans les grains d'orientation molle et en évitant une striction précoce. En ce qui concerne la bainite, il semble que l'agrégat une couche, traduit mieux la déformation observée expérimentalement.

La représentativité des agrégats se pose ici car 3 à 5 grains austénitiques sont modélisés. Pour vérifier si nos résultats peuvent être généralisés ou bien si chaque agrégat représente un cas particulier, nous avons comparé les motifs étudiés dans ce chapitre, avec ceux du chapitre IV.

#### 3-1 Représentativité des agrégats avec et sans MHE

Les tailles des motifs étudiés sont rappelées sur le schéma ci dessous :

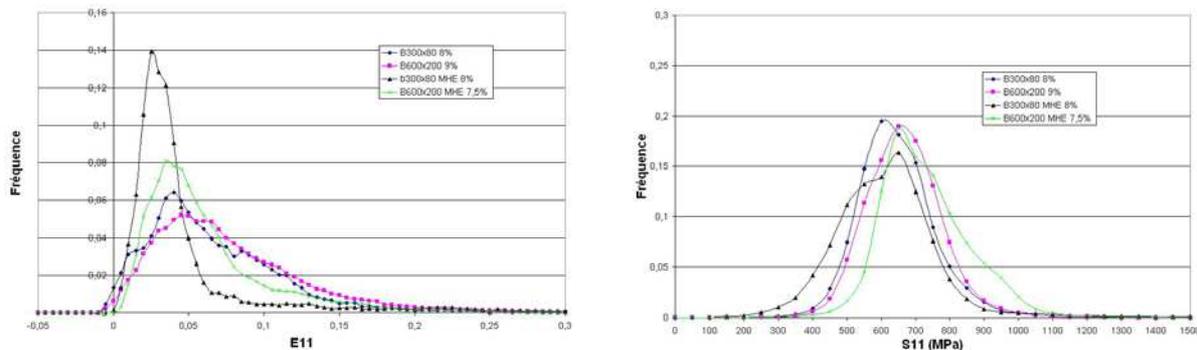
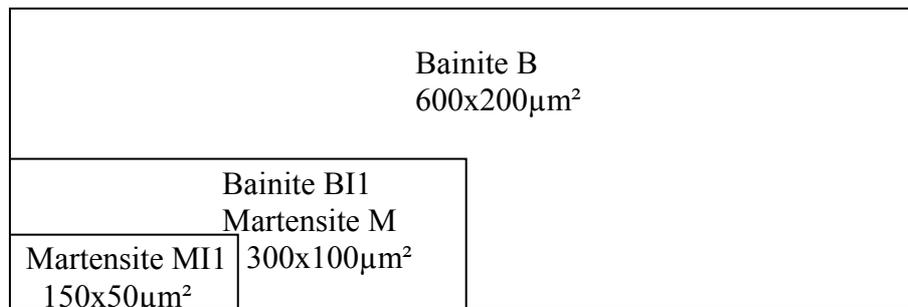


Figure V-9 : Histogrammes  $E_{11}$  et  $S_{11}$  pour les 2 motifs de bainite avec et sans MHE.

La présence d'un MHE différencie nettement les deux échantillons, elle réduit les hétérogénéités dans la bainite. La répartition locale des déformations est fortement modifiée. Les simulations sans MHE sont plus en accord avec les observations de surface, elles montrent dans les entités de taille importante (20 $\mu\text{m}$ ) où l'orientation est proche de [100] et pour un voisinage particulier, une déformation intragranulaire en bandes de localisation qui s'accompagnent de contraintes internes. Les bandes intergranulaires dites « de structure » ne dépendent à notre avis que du chargement et n'induisent pas de contraintes. Il n'a pas été possible de vérifier si les bandes correspondaient au glissement grossier observé dans la bainite.

## Martensite

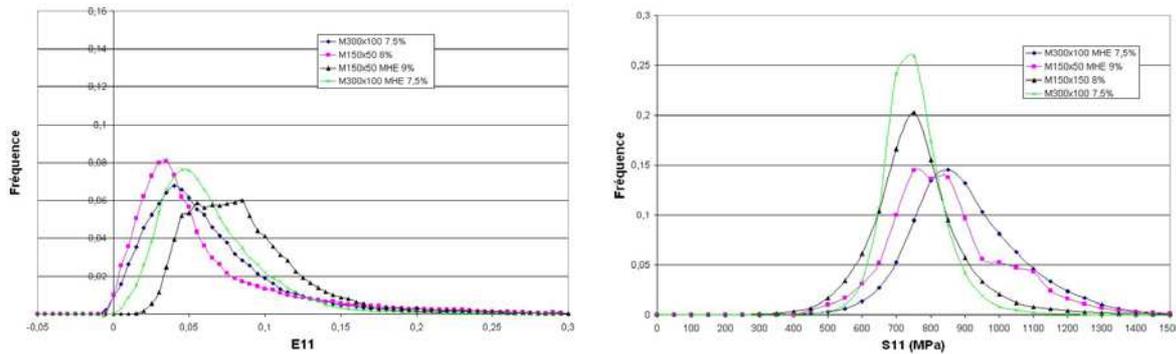


Figure V-10 : Histogrammes E11 et S11 pour les 2 motifs de martensite avec et sans MHE.

La présence du MHE qui simule la couche inférieure de grains est, dans la martensite où la taille des entités cristallographiques est faible ( $<10\mu\text{m}$ ), indispensable pour avoir un accord avec les observations. Les courbes de distribution de E11 mettent en évidence une hétérogénéité du même ordre de grandeur, quelque soit le motif et la présence ou l'absence du MHE. Localement, les cartes montrent de grandes différences, mais elles soulignent toute l'importance de couples d'orientations critiques dans la génération de fortes déformations intra lattes engendrant elles mêmes de fortes contraintes résiduelles à courte portée ( $<1\mu\text{m}$ ).

Les courbes de distribution de S11 montrent que la présence du MHE élargit les pics et les déplace vers les fortes contraintes. Plus de 5% de la surface de l'échantillon supporte des contraintes supérieures à 1100MPa.

### Effet de l'orientation des vecteurs de Burgers par rapport aux interfaces

On remarque que les plus fortes contraintes sont dans les grains d'orientation Bleue ou Rose-Orange. Ceci traduit une difficulté d'accommodation liée en partie aux obstacles des joints de latte. Pour mieux comprendre cet effet, nous avons modélisé deux bicristaux d'orientations R/B et B/R. la différence entre les deux bicristaux est l'orientation des vecteurs de burgers par rapport à l'interface. Les résultats sont donnés dans l'annexe V-2. On constate que l'état de contrainte varie d'un bicristal à l'autre et les résultats obtenus sont en bon accord avec les résultats du polycristal. On montre également que le MHE modifie les contraintes sur une à deux couches d'éléments. A partir de 3 à 4 couches, on retrouve les effets d'interaction de grain à grain.

### Portée des contraintes internes, zone critique dans la martensite

Le MHE augmente la surface de joints MHE/agrégat incompatible et les contraintes augmentent globalement. L'étude des bicristaux confirme que la portée des contraintes internes est de l'ordre d'une couche d'élément, soit une portée égale voire inférieure à  $0,5\mu\text{m}$ .

## Comparaison du comportement de la bainite et de la martensite

Les courbes de traction sont données sur la figure V-12

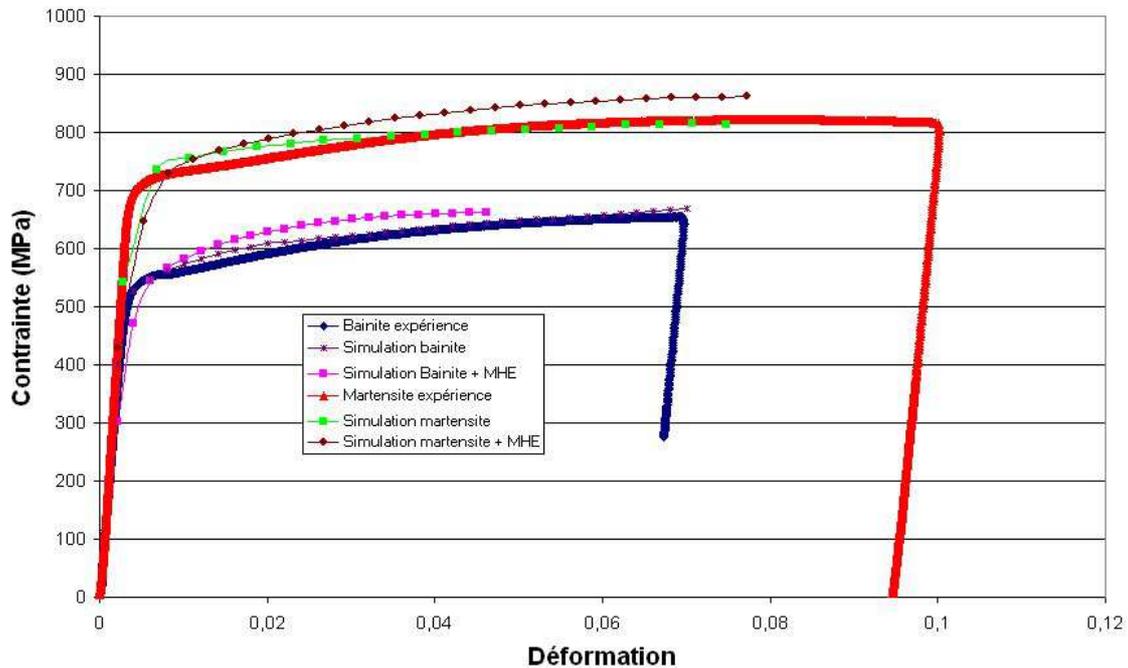


Figure V-11 : Courbes de traction de la bainite et de la martensite.

On constate que pour les déformations supérieures à 2%, le MHE durcit les matériaux, mais modifie peu les pentes d'écrouissage.

La grande différence entre la bainite et la martensite est l'absence de bandes intragranulaires de localisation dans la martensite. Dans ce matériau, les petits paquets de lattes sont soumis à une déformation assez uniforme, les fines bandes de localisation ( $<5\mu\text{m}$ ) qui réunissent ces paquets de lattes, sont orientées à 40-45 degrés de l'axe de traction. Les bandes de contraintes sont plus intenses et localisées dans quelques anciens grains austénitiques. Les bandes de contraintes ne s'appuient pas sur les anciens joints de grains austénitiques ce qui aurait pour effet de solliciter fortement ces interfaces de faible cohésion. Il semble, mais cela reste à vérifier, que des petits grains situés sur les ex-joints de grains austénitiques écrantent l'effet des contraintes. Ces petits grains peuvent être le résultat d'une mauvaise indexation au voisinage des joints de grains.

Nous avons reporté sur le même graphe, les histogrammes de la bainite et de la martensite, pour une elongation de  $e=7,5\%$  (figures V-12 et V-13).

BMHE :  $\langle E_{11} \rangle = 7,1\%$ ,  $\langle S_{11} \rangle = 804$  MPa

MMHE :  $\langle E_{11} \rangle = 7,1\%$ ,  $\langle S_{11} \rangle = 978$  MPa

B:  $\langle E_{11} \rangle = 7,6\%$ ,  $\langle S_{11} \rangle = 720$  MPa

M:  $\langle E_{11} \rangle = 7,1\%$ ,  $\langle S_{11} \rangle = 826$  MPa

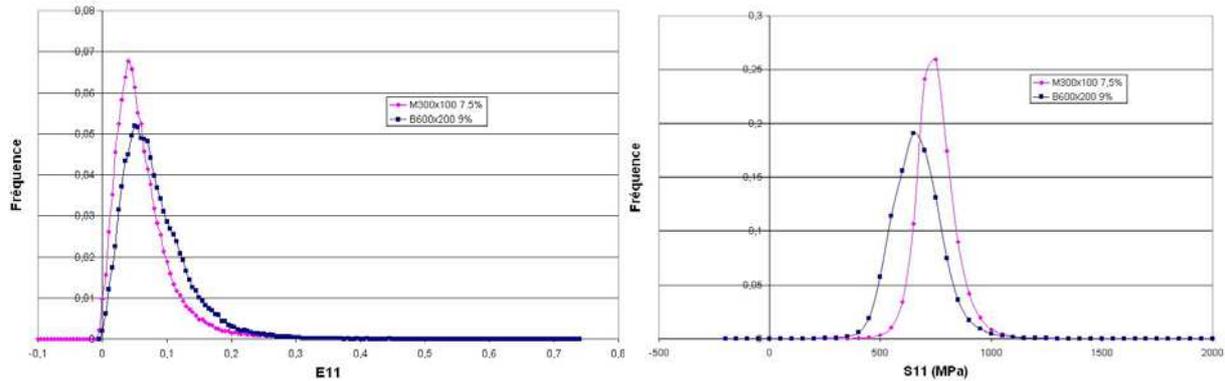


Figure V-12 : Comparaison des histogrammes  $E11$  et  $S11$  pour la bainite et la martensite sans MHE.

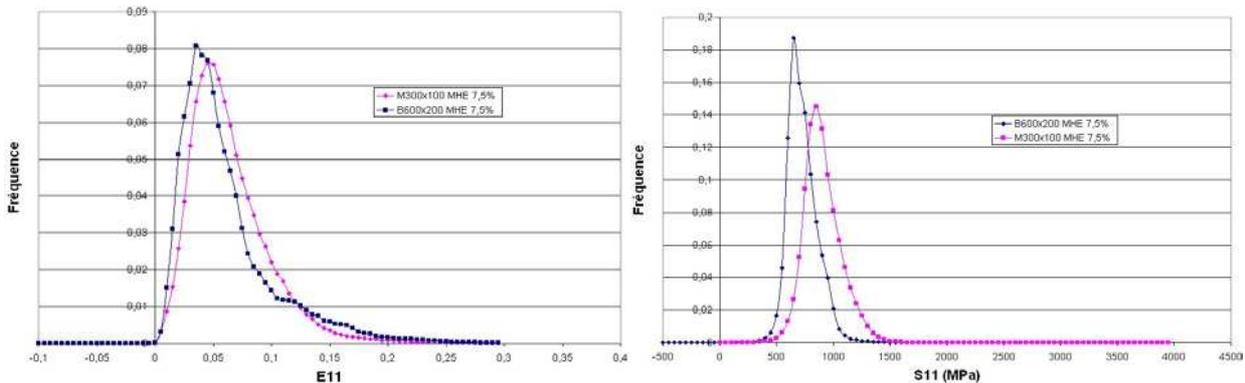


Figure V-13 : Histogrammes comparatifs  $E11$  et  $S11$  pour la bainite et la martensite avec MHE.

En l'absence de MHE, les deux motifs, malgré des tailles et des taux de déformation différents, présentent des distributions de  $E11$  globalement proches.

Avec ou sans MHE, la courbe  $S11$  de la martensite est décalée vers les fortes contraintes, par rapport à celle de la bainite mais l'amplitude de la translation correspond à la différence des limites d'élasticité. La différence entre les valeurs moyennes de  $S11$  est de 173 MPa avec MHE et de 116MPa sans MHE, celle entre les limites d'élasticité est de 140 à 160 MPa. Il est donc évident que l'écroutissage des deux matériaux étant proche, la différence de limite d'élasticité est prépondérante dans les différences des comportements macroscopiques de la bainite et de la martensite. Seule l'approche très locale met en évidence des comportements différents.

#### 4- CHAMPS MÉCANIQUES LOCAUX ET ENDOMMAGEMENT

L'étude de l'endommagement des aciers de cuve 16MND5, a fait l'objet de nombreux travaux, ([RAO99], [NAU99], [YAY97], [HAU02]) La majorité de ces travaux considèrent l'effet de la microstructure sur l'endommagement, sous un aspect essentiellement métallurgique. Les approches locales de la rupture utilisées, s'appuient sur des calculs de champs mécaniques locaux où sont pris en compte la géométrie de la structure, le chargement imposé, le comportement macroscopique du matériau, voir la présence d'inclusions. A notre connaissance, l'effet de la microstructure sur les champs mécaniques locaux n'a pas été étudié.

Les procédés de mise en forme, les traitements thermomécaniques et de revenus de l'acier 16MND5 des cuves REP, induisent des micro-ségrégations en peau interne de la cuve. Ces zones souvent appelées veines sombres, enrichies en élément d'alliage et en impuretés, de structure martensitique, jouent un rôle important sur le comportement mécanique de l'acier et

tout particulièrement sur ses propriétés à la rupture comme la ténacité. Les veines sombres de longueur millimétriques ont été décrites en détail au niveau chimique, métallurgique et mécanique [NAU99].

Les veines sombres présentent par rapport à la matrice, un enrichissement en carbone (15 à 30%), en manganèse (20 à 70 %) et surtout en phosphore (25 à 500%) ; la microstructure de la matrice est du type bainitique tandis que les veines sombres sont du type martensitique. La fragilité intergranulaire a été mise en évidence dans les zones micro-ségrégées. Le phosphore ségrégué aux joints de grains en est le principal responsable. Bien que la ségrégation semble affecter tous les joints de grain et joints inter-latte, la rupture intergranulaire suit plus particulièrement les anciens grains austénitiques dont la morphologie se prête mieux à la ségrégation que les joints de paquets de lattes qui présentent une bonne cohésion.

Dans la bainite supérieure, les carbures de forme lenticulaire et regroupés en amas seraient des sites favorables à l'amorçage de la rupture par clivage. Dans la martensite, les carbures sont répartis uniformément, sous formes de fins précipités sphériques qui durcissent la matrice et la rendent moins sensible à la rupture par clivage et donc plus sensible à la rupture intergranulaire. Comme la cohésion des joints de lattes dans la martensite est plus grande que celle de la bainite, la fragilité intergranulaire est mise sur le compte des anciens grains austénitiques. Quant à la contrainte critique de décohéation intergranulaire, elle diminue avec la cohésion des joints et peut devenir inférieure à la contrainte de clivage.

La présence d'inclusions de sulfure de manganèse dans les veines sombres est également considérée comme un facteur d'amorçage de l'endommagement. Cependant, Yahya [YAH97] a mis en évidence deux types de mécanismes de rupture :

- des ruptures sous très faible déformation plastique où les sulfures sont des sites d'amorçage,
- des ruptures dans des éprouvettes ne contenant pas de sulfure, dont l'origine proviendrait des hétérogénéités de déformation plastique.

En résumé, dans la bainite supérieure, la contrainte critique intergranulaire est plus élevée que la contrainte critique de clivage. L'amorçage de la rupture se fait par clivage et se poursuit par une rupture ductile. Dans la martensite, l'amorçage se ferait par rupture intergranulaire qui induirait une rupture précoce par clivage suivie par une rupture fragile à des températures où la bainite est normalement ductile. Quant à l'amorçage par décohéation des sulfures, il a été objecté que la décohéation relaxe les contraintes internes, même si elle laisse un défaut.

Dans tous les cas, la rupture est observée sous des taux importants de triaxialité des

contraintes :  $\frac{\frac{1}{3}\sigma_{kk}}{\text{contrainte équivalente}}$ .

Selon Naudin, pour des aciers de teneur en carbone de 0,25 à 0,29 % masse, la contrainte critique à rupture en fonction du taux  $X_p^{gb}$  de recouvrement en phosphore des joints est :

$$\sigma_c^{inter} = -1999 X_p^{gb} + 2447 (MPa).$$

Pour des températures comprises entre -100°C et -60°C, une descente en température de 20°C/s (diagramme TRC) et un taux de phosphore de 6,5% par atome, la contrainte critique intergranulaire est comprise entre 1553MPa et 2013 MPa et la contrainte critique de clivage

$$\sigma_c^{clivage} \approx 2300 MPa$$

L'étude présentée ici est différente, car il n'y a pas eu de fragilisation spécifique par le phosphore. Les deux microstructures analysées ont la même composition chimique et les joints sont peu chargés en phosphore. Le chargement correspond à des essais de traction simple sur éprouvettes plates, donc le taux de triaxialité est très faible, même si localement l'état de contrainte n'est pas uniaxial. La taille des anciens grains austénitiques est difficile à évaluer ( $\approx 50\text{ à }100\mu\text{m}$ ), mais varie peu d'une microstructure à l'autre.

Comme on l'a déjà vu dans les chapitres précédents, la martensite comporte beaucoup plus de joints que la bainite, mais les répartitions des désorientations de joints sont proches (figure II). La distribution des contraintes internes dans la martensite est plutôt de type intergranulaire à l'intérieur des anciens grains austénitiques. Les contraintes aux joints entre paquets de lattes sont, pour certains couples de variants, très élevées.

Afin de comprendre, en l'absence d'éléments fragilisants, l'influence de la microstructure et des contraintes internes qu'elle engendre, les contraintes normales aux interfaces (anciens grains austénitiques, paquets de lattes), le calcul des contraintes normales aux interfaces a été effectué. Les résultats dépendent de la méthode utilisée pour discrétiser les joints.

#### 4-1 Contraintes normales aux joints

##### 4-1-1 Représentation des joints

Un exemple de discrétisation des joints est donné sur la figure V-14.

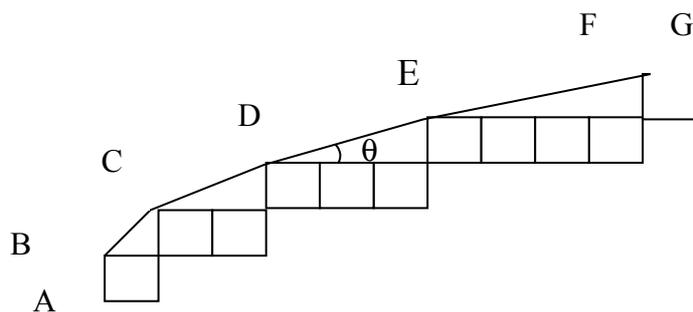


Figure V-14 : Exemple de représentation d'un joint de grains.

Soit un élément de taille  $0,5\mu\text{m}$  pour des tailles d'entités cristallographiques de  $10\mu\text{m}$ , en ajoutant  $n$  éléments comme dans la figure ci-dessus, on décrit des joints inclinés de  $\theta$  par rapport à la sollicitation avec  $\text{tg}\theta = \frac{l}{n}$ .

$$\text{tg}\theta = \frac{l}{n}$$

n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$\theta$	0	45	63.4	71.5	75.9	78.7	80.5	81.8	82.8	83.6	84.3	84.8	85

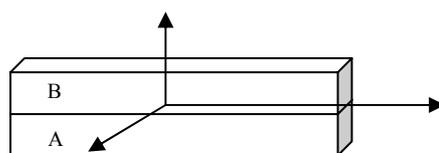


Figure V-15 : Schématisation du bicristal.

Considérons le bicristal formé de deux grains A et B, soit  $\vec{n}(-\sin\theta, \cos\theta, 0)$  la normale à l'interface orientée de A vers B. Le vecteur contrainte est donné par

$$\vec{T} = \begin{cases} -\langle\sigma_{11}\rangle\sin\theta + \langle\sigma_{12}\rangle\cos\theta \\ -\langle\sigma_{12}\rangle\sin\theta + \langle\sigma_{22}\rangle\cos\theta \\ -\langle\sigma_{13}\rangle\sin\theta + \langle\sigma_{23}\rangle\cos\theta \end{cases} \text{ où } \langle \rangle \text{ désigne la valeur moyenne de la contrainte sur le joint}$$

La contrainte moyenne normale au joint est

$$\sigma_N = \langle\sigma_{11}\rangle\sin^2\theta + \langle\sigma_{22}\rangle\cos^2\theta - 2\langle\sigma_{12}\rangle\sin\theta\cos\theta,$$

$$\text{avec } \langle\sigma_{ij}\rangle = \frac{\sum \sigma_{ij}}{n} \text{ où } n \text{ est le nombre d'éléments constituant le joint}$$

Les contraintes de cisaillement étant faibles :

$$\sigma_N \approx \langle\sigma_{11}\rangle\sin^2\theta + \langle\sigma_{22}\rangle\cos^2\theta$$

Il n'a pas été possible, pour des questions de temps, de déterminer les angles  $\theta$  et la longueur en UA des segments formant les joints de ces structures complexes. Nous avons donc reporté pour chaque segment constituant les joints la contrainte normale, qui, du fait de notre discrétisation et soit  $\sigma_{11}$  soit  $\sigma_{22}$ . Cette technique donne une bonne description des joints proches de  $\theta=0$  et  $\theta=90^\circ$  et conduit à une forte erreur pour les joints proches de  $\theta=45^\circ$ .

Les contraintes ne sont pas toutes continues au voisinage d'une interface. On doit avoir en tout point :  $\vec{T}^A = \vec{T}^B$  donc

$$-\Delta\sigma_{11}\sin\theta + \Delta\sigma_{12}\cos\theta = 0$$

$$-\Delta\sigma_{12}\sin\theta + \Delta\sigma_{22}\cos\theta = 0$$

$$\text{avec } \Delta\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^B - \sigma_{ij}^A$$

Avec la représentation utilisée, on a pour  $\theta=0$   $\sigma_n = \sigma_{22}$  et pour  $\theta=90^\circ$   $\sigma_n = \sigma_{11}$ , les contraintes de cisaillement étant inférieures à  $\pm 200\text{MPa}$ , nous les avons négligées. Dans ce cas, les discontinuités aux éléments constituant les interfaces sont faibles.

Remarque : la description des joints par un escalier n'induit pas de contraintes internes importantes susceptibles de masquer des effets de joints. En effet, comme il a été signalé dans le chapitre IV, seule la modification des orientations entraîne celle des contraintes. Les conséquences d'une telle description sur les contraintes locales avaient été examinées par P. Eriau [ERI03]. La comparaison de différents maillages permettait de conclure que les effets étaient négligeables sur les déformations et les contraintes calculées.

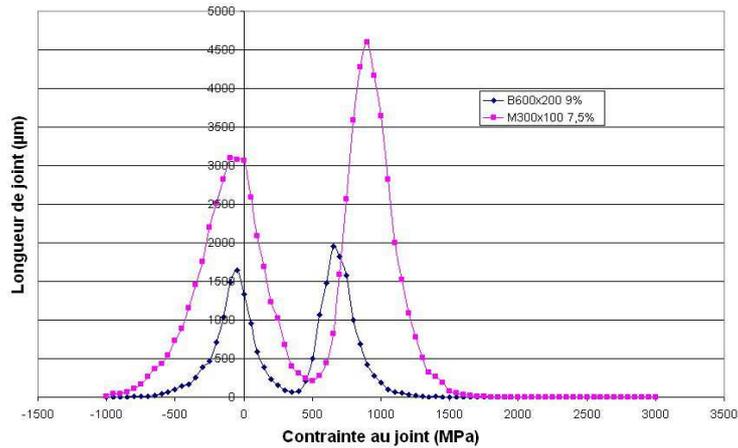


Figure V-16: Courbes donnant pour B11 et M11, les longueurs de joints en fonction des contraintes  $\sigma_{11}$  (pic de droite) et  $\sigma_{22}$  (pic de gauche).

On constate que la longueur de joints présentant localement des contraintes normales supérieures à 1000MPa est beaucoup plus élevée dans la martensite que dans la bainite, d'où une probabilité de rupture intergranulaire plus grande. Sur la courbe, on ne peut distinguer les joints des anciens grains austénitiques et les joints de lattes nettement plus nombreux. Notons qu'en moyenne les contraintes  $\sigma_{22}$  sont nulles, ce qui est cohérent avec un essai de traction.

Si on compare la fréquence, c'est-à-dire le pourcentage d'éléments présentant une contrainte donnée par rapport au nombre total d'éléments du maillage, la différence entre bainite et martensite apparaît plus faible et la présence d'un MHE ne modifie pas la répartition des contraintes comme le montre la figure V-18.

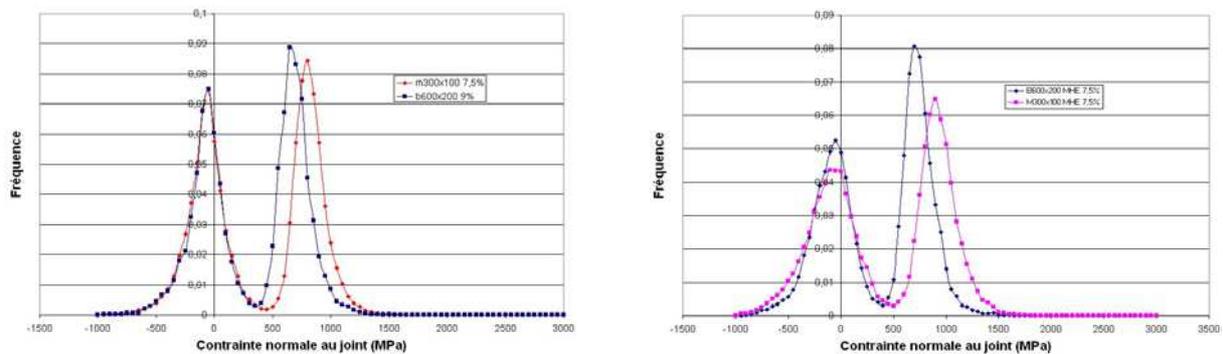


Figure V-17 : Contraintes locales normales aux joints pour la bainite et la martensite avec et sans MHE

La contrainte principale maximale aux interfaces est très proche de S11.

Bainite :

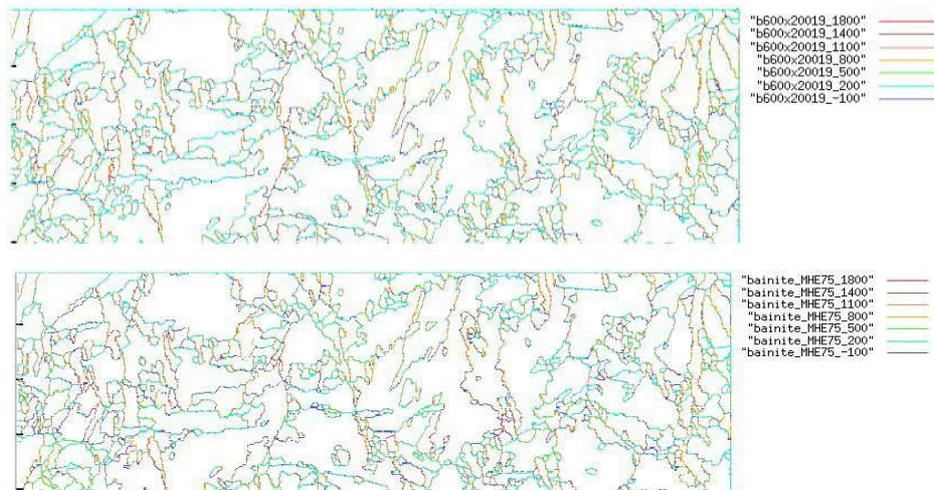


Figure V-18 : *BainiteB : Distribution des contraintes normales aux joints*  
*haut : e=9% et sans MHE, bas :=7,5% avec MHE*

Martensite

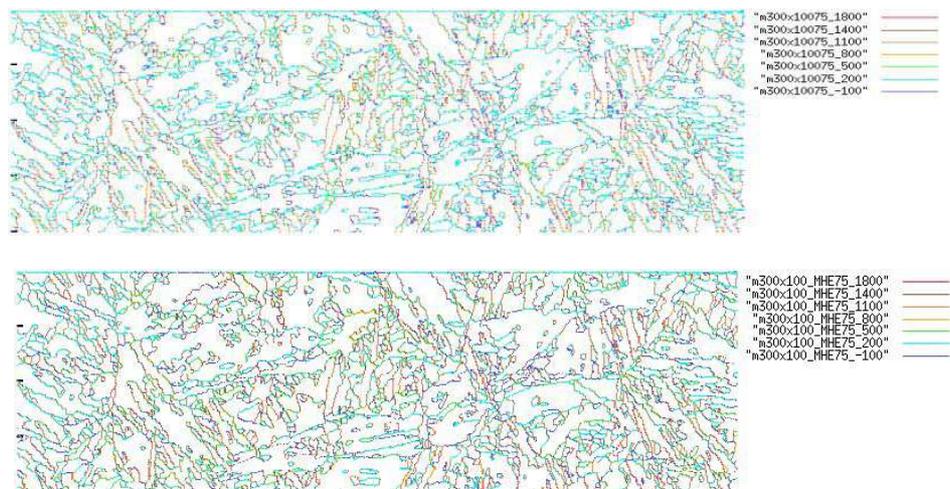


Figure V-19 : *Martensite : Distribution des contraintes normales aux joints*  
*(haut, e=7,5%. sans MHE, bas, e=7,5% avec MHE)*

On constate que les joints perpendiculaires à l'axe de traction sont les plus chargés et les joints parallèles à cet axe les moins chargés. L'état de contrainte sur les interfaces présentant une direction proche de 45° par rapport à l'axe de traction, varie en fonction des orientations cristallines situées de part et d'autre. Bien que les contraintes normales soient entachées d'erreur, les variations donnent néanmoins une indication des fluctuations dans l'agrégat.

#### 4-1-2 Observations au MEB des plaquettes de cémentite d'une bainite déformée de 5%

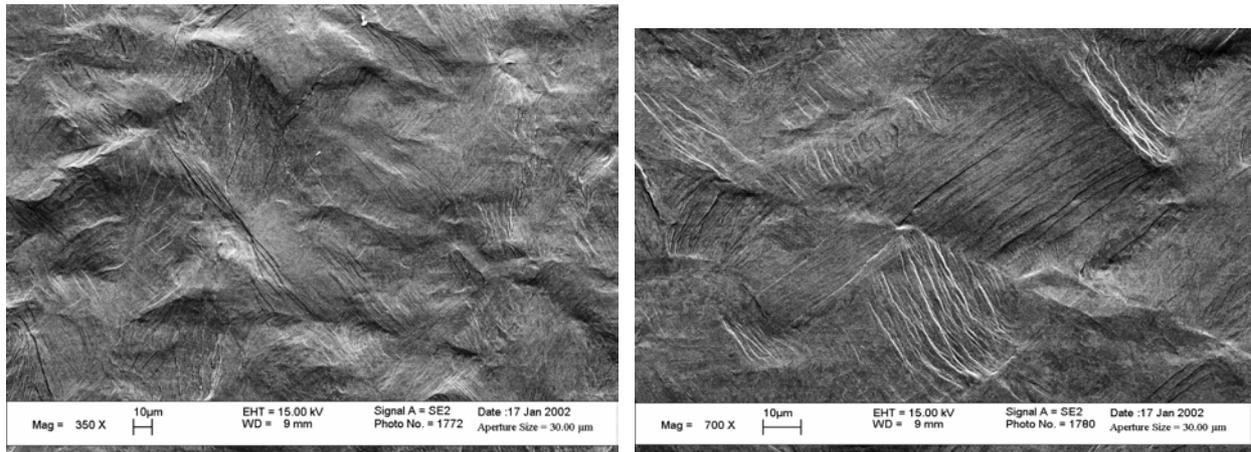


Figure V-20 : Clichés MEB d'une bainite déformée macroscopiquement de 5%.

Les contrastes observés sur la figure V-20, correspondent à des lignes de glissement sinueuses et au relief des interfaces. Les lignes de glissement ne traversent pas les interfaces.

#### Interaction glissement plastique et plaquettes de cémentite

Les lignes de glissement traversent les plaquettes sans changement notable d'orientation, mais présentent des décrochements (figure V-20). Lorsque les carbures sont parallèles à la direction de traction, il y a rupture de ceux-ci au passage des lignes de glissement (figures V-22). A 5% de déformation macroscopique, la rupture des carbures longs laisse une cavité. Au niveau de l'extrémité du carbure rompu, on observe de courtes lignes de glissement permettant probablement d'accommoder les incompatibilités liées aux singularités de déformation dans cette zone.

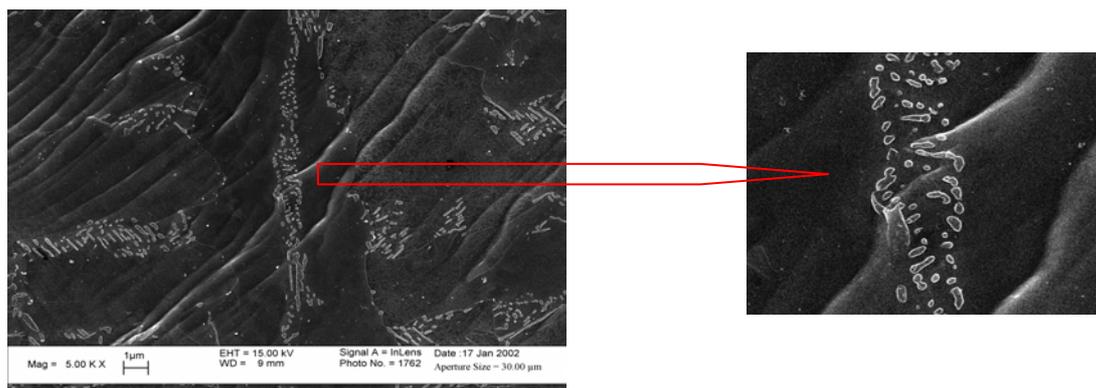


Figure V-21 : Bainite, interaction entre les lignes de glissement et les îlots de cémentite

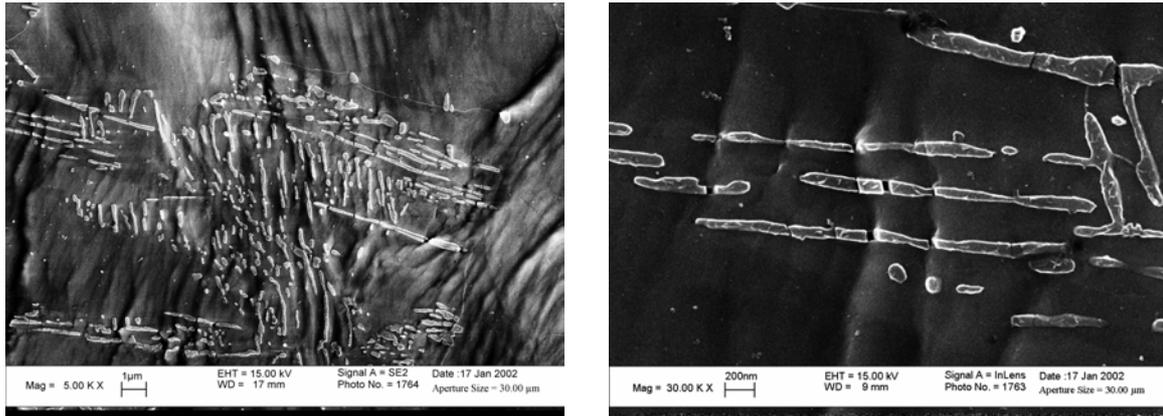


Figure V-22 : *Influence de l'orientation des carbures sur leur interaction avec les lignes de glissement (gauche). Rupture des carbures allongés suivant la direction de sollicitation (droite), direction de sollicitation horizontale.*

Dans la bainite, la rupture des plaquettes de cémentite peut constituer un site d'amorçage de fissures. Mais ce phénomène n'est pas prépondérant.

## 5 DISCUSSION SUR LA RUPTURE INTERGRANULAIRE

A température ambiante, en traction simple il ne peut y avoir de rupture intergranulaire de la martensite, notre démarche n'a eu comme objectif que de proposer un premier outil susceptible de mettre en évidence les différences entre le comportement local des deux microstructures étudiées.

D'un point de vue macroscopique et à température ambiante, les comportements macroscopiques en traction simple de la bainite et de la martensite revenues, ne se distinguent que par une différence portant sur la limite d'élasticité et le domaine de ductilité. Les pentes d'érouissage sont quasiment identiques. Pourtant, d'un point de vue métallurgique, les deux matériaux se distinguent par des microstructures différentes et aussi par un érouissage intracristallin plus important dans la martensite que dans la bainite du fait de la présence de fins carbures.

Dans le modèle, l'existence du carbone influe sur les valeurs des paramètres matériaux  $\tau_0$ ,  $K$  lié à la création de dislocations et  $G_C$  correspondant à une distance d'annihilation des dipôles. Identifié sur des polycristaux, ces paramètres intègrent de plus le comportement du grain contraint et non celui du monocristal.

L'identification faite sur un seul type d'essai n'est pas satisfaisante. C'est pourquoi nous avons étudié numériquement le comportement de « monocristaux ». cette étude montre que bainite et martensite ne présentent que peu de différence en ce qui concerne l'orientation dite Bleue : activation et durcissement du système primaire puis activation du système secondaire. Concernant l'orientation dite Rose-Orange, on note quelques différences. En effet, avec les paramètres identifiés le système primaire est activé mais ne durcit pas, en revanche la densité de dislocation augmente fortement sur le système secondaire qui ne s'active pas. Ceci pourrait expliquer que cette orientation « molle » à faible déformation, relaxe difficilement les contraintes internes, et cela d'autant plus que les obstacles dus aux interfaces sont proches.

Les simulations montrent que l'orientation Rose-Orange, couplée à l'orientation Bleue est critique. Les contraintes sont localisées en moyenne près des joints de lattes et les anciens grains austénitiques présentent une forte énergie stockée (figure en annexe V3). Les seules zones non contraintes sont le voisinage immédiat des anciens joints austénitiques. Ce résultat semble en contradiction avec la possibilité d'endommagement intergranulaire. Deux arguments peuvent alors être avancés pour expliquer la rupture intergranulaire dans la martensite :

- Le seul moyen de libérer l'énergie emmagasinée dans les grains de martensite est la création de surface libre autour du grain.

- Notre description du voisinage du joint austénitique est incomplète. Si les lattes débouchent sur ce joint elles induisent forcément en tête de lattes des contraintes très locales mais très fortes, pouvant entraîner la décohésion du joint.

Dans la bainite, les « bandes de contraintes » traversent les ex-grains austénitiques qui ne jouent plus de rôle d'obstacle, les entités cristallographiques sont de taille suffisante pour que les systèmes secondaires soient actifs et accommodent peu à peu les contraintes.

## CHAPITRE VI

### CONCLUSION

Ce travail est une contribution à l'étude de l'influence de la microstructure sur les champs mécaniques locaux liés aux mécanismes de plasticité, de matériaux bainitique et martensitique. A plus long terme, cette étude doit servir de base au développement de critères d'endommagement, ce qui nécessitera d'introduire l'effet de la température sur la plasticité et de prendre en compte le clivage.

Du fait de la complexité morphologique et métallurgique de ces matériaux, peu d'études concernent le rôle de la plasticité cristalline sur l'endommagement. Beaucoup de travaux [NAU99], [RAO99], [YAH97] et [HAU02] dans le domaine de l'endommagement et de la rupture des aciers de cuve, ont porté sur la fragilisation aux joints de grains, due à la ségrégation du phosphore et sur l'amorçage des fissures sur les inclusions telles que les sulfures de manganèse. Dans tous les cas, les auteurs se sont intéressés à la rupture à froid, dans l'intervalle  $-40^{\circ}\text{C}$ ,  $-200^{\circ}\text{C}$ , sous un fort taux de triaxialité. Cependant, il a été montré que les contraintes et les déformations à la rupture d'éprouvettes lisses, déformées en traction, entre 0 et  $-200^{\circ}\text{C}$ , présentaient une grande dispersion et que le traitement de fragilisation ne conduisait pas forcément à la rupture fragile intergranulaire. En effet, la rupture s'effectue pour des déformations plastiques élevées parfois par clivage, alors que la contrainte critique intergranulaire est inférieure au seuil de plasticité.

Notre étude est une tentative pour dégager à température ambiante et pour des chargements simples, la contribution des champs mécaniques locaux en liaison avec la microstructure du matériau. Les deux matériaux étudiés, obtenus par traitement thermique d'un même lopin d'acier 16MND5, ont la même composition chimique et un taux de phosphore identique (0,014%). La taille des anciens grains austénitiques est comprise entre 50 et 100  $\mu\text{m}$  et nous avons considéré que la longueur des anciens joints austénitiques était identique dans les deux structures. Les microstructures et les courbes de traction sur éprouvettes plates présentent les caractéristiques classiques d'une bainite supérieure et d'une martensite revenues : limite d'élasticité moyenne de 550 MPa et de 715 MPa, pente d'écrouissage identique de l'ordre de 2 GPa.

Les analyses de la texture locale par EBSD sont conformes à la littérature, la bainite supérieure présente des entités cristallines de 10 à 30  $\mu\text{m}$  et la martensite une structure fine en paquets de lattes d'épaisseur inférieure à 10 $\mu\text{m}$ . Les distributions des désorientations entre entités voisines, sont très proches pour les deux microstructures. La longueur des joints à surface égale de matériau est quatre fois supérieure dans la martensite que dans la bainite.

De nos observations, il se dégage que la déformation plastique présente (en surface) quelques différences d'un matériau à l'autre : fines lignes de glissement (en général une seule famille) dans les lattes de martensite, des paquets de glissement grossier et sinueux dans les entités cristallographique de la bainite, avec parfois un cisaillement intense rectiligne (glissement des joints ?). Dans les deux cas, à des taux de déformation inférieurs à 8%, les reliefs aux joints de lattes et aux joints entre entités cristallines sont importants et ne peuvent être négligés.

Le modèle utilisé est identique pour les deux microstructures, la grande différence porte, après identification par méthode inverse, sur la valeur de  $\tau_0$  qui ne correspond plus ici à la friction de réseau, mais prend en compte, dans une valeur moyenne, le rôle durcissant du carbone, bien que l'effet soit différent dans les deux matériaux. Les interactions entre obstacles se

résumant aux interactions du type forêt. Bien que les « paramètres matériaux » présentent quelques différences entre la bainite et la martensite, on peut se poser la question de leur signification, en effet rien n'existe à ce sujet dans la littérature. Ces précautions étant prises, les faibles différences entre les paramètres matériaux semblent suffisantes pour conduire, pour certaines orientations cristallines, à des différences de comportement. Un autre paramètre important du modèle, repose sur l'identification des densités de dislocations initiales. L'identification conduit à des densités de dislocations quasi-identiques dans la bainite et la martensite, ce qui est cohérent avec le traitement de revenu. Les valeurs mesurées mais peu statistiques, bien que plus élevées dans la martensite que dans la bainite, n'ont pas pu être utilisées, car nous n'avons pas pu faire converger nos simulations.

Le choix de la taille des agrégats est dicté par les temps de calcul, donc par la finesse de la microstructure. La taille des agrégats de bainite est de ce fait, quatre fois supérieure à celle des martensites. Deux cas ont été étudiés, des agrégats une couche et des agrégats deux couches où la deuxième couche isotrope présente le comportement du MHE correspondant, ceci afin de rendre compte d'une interaction moyenne avec la couche inférieure de grains. Le problème de la représentativité des agrégats étudiés se pose également. Si les valeurs moyennes globales, obtenues avec les histogrammes laissent croire que les agrégats sont représentatifs, les valeurs locales montrent que différentes situations, non équivalentes, peuvent se présenter dans les agrégats et qu'une bonne description du motif étudié est essentielle dans la compréhension des phénomènes critiques.

Un premier point à signaler est que l'addition d'un MHE à une couche de grains, durcit l'agrégat final, du fait des interactions supplémentaires MHE/grains.

La validation de la modélisation s'est faite en comparant les champs de déformations mesurés et simulés, d'un agrégat appartenant à une éprouvette de traction déformée en traction et dont la microstructure a été déterminée par EBSD et sur lequel a été déposée une microgrille. La mesure de la déformation ne prend pas en compte le relief, ce qui conduit à une erreur non négligeable. La prise en compte du relief s'avère indispensable, elle est possible par stéréographie, mais augmente les temps d'expérience. Les grilles ne sont, pour les matériaux de petites tailles de grains, pas parfaitement adaptées, bien qu'elles permettent une bonne visualisation des lignes de glissement.

Nos résultats montrent que pour la bainite, le champ de déformation simulé sans MHE est plus proche des résultats expérimentaux. L'inverse est observé pour la martensite. L'hypothèse la plus raisonnable pour expliquer ces différences est le rapport : portée des contraintes internes/taille des entités cristallographiques. Ce rapport dépend du maillage, mais les études sur bicristaux, montrent bien que la portée des contraintes est faible en valeur absolue. L'effet de la couche inférieure de grains est négligeable par rapport à la taille des entités cristallographiques de la bainite et doit être prise en compte dans la martensite.

Dans ce dernier cas, la carte simulée du relief (E33) avec un MHE rend assez bien compte de la déformation de l'agrégat de martensite.

Il est assez illusoire de vouloir retrouver une concordance parfaite entre simulations et expériences dans des cas aussi complexes, mais ce type de modélisation met en évidence un certain nombre de résultats :

- Dans les deux microstructures, on observe une localisation en bandes liées à des effets de structure et de chargement, et n'induisant que de faibles contraintes. Cependant la position de ces bandes est dictée par les joints qui sont des zones dures.
- Les effets de la morphologie (orientations voisines et taille des entités cristallographiques), sont prépondérants comme nous l'avons montré au chapitre IV.
- La formation, dans la bainite, de bandes intragranulaires de déformation et de contrainte est un phénomène assez proche de celui observé sous irradiation [ONI03] avec des mécanismes d'adoucissement local probablement différents.

- Une déformation plus homogène dans les lattes de martensite, mais induisant pour certains couples d'orientations cristallines des contraintes supérieures à 1500MPa. Pour des raisons de relation de voisinage, les zones contraintes sont, dans la martensite, localisées dans les anciens grains austénitiques. Il semble que dans la martensite du fait des obstacles liés aux joints de lattes, la déformation plastique relaxe difficilement les contraintes. Le MHE en limitant les rotations du réseau cristallin exacerbe le phénomène.
- Enfin la présence d'îlots de cémentite confère à la bainite un comportement de biphasé, mais il est impossible ici de déterminer l'importance de ce phénomène par rapport aux effets d'incompatibilité de la déformation plastique.
- Il apparaît nécessaire de mieux connaître les mécanismes en jeu dans le domaine de microplasticité. La matrice d'interaction utilisée pour décrire de façon simple, les interactions entre les arbres de la forêt, conduit à un stade I trop grand. Il sera facile d'y remédier, sachant qu'au-delà de 10% de déformation, la matrice d'écroutissage l'emporte et masque en partie les effets de la matrice d'interaction.

En ce qui concerne l'endommagement, un défaut de notre modèle est une description des joints « en escalier » ne permettant pas un calcul satisfaisant des contraintes normales aux joints. Dans l'avenir ce problème devra être résolu, sans pour cela perdre cette discrétisation fine. Nous n'avons pas donné de propriétés particulières aux zones adjacentes aux joints, ceci est envisageable (chaque élément du maillage est considéré comme un matériau) mais nécessite une bonne détermination du rôle des éléments diffusés aux joints et une évaluation des densités de dislocations.

L'extension du modèle aux basses et hautes températures est en cours, mais le phénomène le plus important, est à notre avis, d'utiliser pour certaines applications, une approche non locale qui permettrait de mieux rendre compte de la taille des grains et surtout de décrire plus précisément, pour des déformations élevées, la formation des interfaces induites par la déformation.



## BIBLIOGRAPHIE

[AB99] ACHARYA (A.) et BEAUDOIN (A.J.). – Consideration of lattice incompatibility in the evolution of hardening. *In : Proceeding of the Twelfth International Conference on Textures of Materials*, éd. par SZPUNAR (J.A.), pp. 547–552.

[AB00] ACHARYA (A.) et BEAUDOIN (A.J.). – Grain-size effect in viscoplastic polycrystals at moderate strains. *J. Mech. Phys. Sol.*, vol. 48, 2000, pp. 2213–2230.

[AH93] ARGON (A.S.) et HAASEN. – A new mechanism of work hardening in the late stages of large strain plastic flow in F.C.C. and diamond cubic crystals. *Acta metall. mater.*, vol. 41, n11, 1993, pp. 3289–3306.

[AHM56] ALLEN (N.P.), HOPKINS (B.E.) et McLENNAN (J.E.). – The tensile properties of single crystals of high purity iron at temperatures from 100 to -253°C. *Proc. Roy. Soc.*, vol. A234, 1956, pp. 221–246.

[ARI99] ARIZMENDI (D.). – *Simulation par la méthode des éléments finis de la déformation plastique des cristaux à structure cubique centrée en utilisant un modèle basé sur les mécanismes physiques de la plasticité cristalline. Application à des essais de traction d'agrégats polycristallins de fer ff.* – Thèse Université Paris 13, 1999.

[AVL93] AERNOUDT (E.), VAN HOUTTE (P.) et LEFFERS (T.). – Deformation and textures of metals at large strain. *In : Material Science and Technology. A comprehensive treatment*, éd. par CAHN (R.W.), HAASEN (P.) et KRAMER (E.J.), pp. 89–136. – 1993.

[BAC+00] BEAUDOIN (A.J.), ACHARYA (A.), CHEN (S.R.), KORZEKWA (D.A.) et STOUT (M.G.). – Consideration of grain-size effect and kinetics in the plastic deformation of metal polycrystals. *Acta mater.*, vol. 48, 2000, pp. 3409–3423.

[BAL+01] BEAUDOIN (A.J.), ACHARYA (A.), LEVINE (L.), KUBIN (L.) et BECKER (R.) - A model for rate-dependent flow of metal polycrystals based on the slip plane lattice incompatibility - *Materials science and engineering A Structural materials properties microstructure and processing*. vol. 309 (10). 2001. pp. 411-415.

[BAM37] BARRETT (C.S.), ANSEL (G.) et MEHL (R.F.). – Slip, twinning and cleavage in iron and silicon ferrite. *Trans. A.S.M.*, september 1937, pp. 702–736.

[BAR00] BARBE (F.). – *Etude numérique de la plasticité d'agrégats polycristallins.* – Thèse Ecole des Mines de Paris, 2000.

[BB49] BATDORF (S.B.) et BUDIANSKY (B.). – A mathematical theory of plasticity based on the concept of slip. *NACA TN*, 1949, p. 1879.

[BCC+03] BUSSO (E.P.), CAILLETAUD (G.), CESCOTTO (S.), TEODOSIU (C.), HABRAKEN (A.M.), BILLARDON (R.) et DOGHRI (I.) - On the numerical implementation of

non-smooth domains. Part I: Rate-dependent formulations. 6th European mechanics of materials conference : non-linear mechanics of anisotropic materials - *EUROMECH-MECAMAT, Journal de physique IV*, 2003, pp. 255-262.

[BCF01] BUSSO (E.P.), CHEONG (K.S.) et FOREST (S.) - Length scale effects on the macroscopic behaviour of single and polycrystalline FCC crystals. Scale Transitions from Atomistics to Continuum Plasticity - *Journal-de-physique-IV*. vol. 85. 2001. pp. 161-170.

[BDJC01] BARBE (F.), DECKER (L.), JEULIN (D.) et CAILLETAUD (G.). – Intergranular an intragranular behavior of polycrystalline aggregates. part 1 : F.E. model. *Int. J. Plast.*, vol. 17, n4, 2001, pp. 513–536.

[BDMK95] BEAUDOIN (A.J.), DAWSON (P.R.), MATHUR (K.K.) et KOCKS (U.F.). – A hybrid finite element formulation for polycrystal plasticity with consideration of macrostructural and microstructural linking. *Int. J. Plast.*, vol. 11, n5, 1995, pp. 501–521.

[BE80] BHADSHIA (H.K.D.H) et EDMONDS (D.V.). – – *Acta Metall* vol 28, 1980.

[BEC91] BECKER (R.). – Analysis of texture evolution in channel die compression- I. effects of grain interaction. *Acta metall.*, vol. 39, n6, 1991, pp. 1211–1230.

[BEDKD01] BHATTACHARYYA (A.), EL-DANAF (E.), KALIDINDI (S.) et DOHERTY (R.). – Evolution of grain scale microstructure during large strain simple compression of polycrystalline aluminium with quasi-columnar grains: OIM measurements and numerical simulations. *Int. J. Plast.*, vol. 17, 2001, pp. 861–883.

[BFC01] BARBE (F.), FOREST (S.) et CAILLETAUD (G.). – Intergranular an intragranular behavior of polycrystalline aggregates. part 2 : Results. *Int. J. Plast.*, vol. 17, n 4, 2001, pp. 537–563.

[BH60] BAILEY (J.E.) et HIRSCH (P.B.). – The dislocation distribution, flow stress, and stored energy in cold-worked polycrystalline silver. *Phil. Mag.*, vol. 5, 1960, pp. 485 – 497.

[BHA92] BHADSHIA H.K.D.H. – *Bainite in steels* – London, 1992.

[BHS94] BERANGER (G.), HENRY (G.) et SANZ (G.) (édité par). – *Le livre de l'acier*. – Lavoisier, 1994.

[BJ97a] BARNETT (M.R.) et JONAS (J.J.). – Influence of ferrite rolling temperature on grain size and texture in annealed low-C and IF steels. *ISIJ Inter.*, vol. 37, n7, 1997, pp. 706–714.

[BJ97b] BARNETT (M.R.) et JONAS (J.J.). – Influence of ferrite rolling temperature on microstructure and texture in deformed low-C and IF steels. *ISIJ Inter.*, vol. 37, n7, 1997, pp. 697–705.

[BKK94] BUSSO (E.P.), KITANO (M.), KUMAZAWA (T.) - A forward gradient time integration procedure for an internal variable constitutive model of Sn-Pb solder – *International journal for numerical methods in engineering*. vol. 37 (4). 1994. pp. 539-558.

[BL41] BARETT (C.S.) et LEVENSON (L.H.). – Analysis of the cold rolling texture of iron. *A.I.M.E. Trans.*, vol. 145, 1941, pp. 281–288.

[BMC96] BUSSO (E.P.) et MCCLINTOCK (F.A.) - A dislocation mechanics-based crystallographic model of B2-type intermetallic alloy – *International journal of plasticity*. vol. 12 (1). 1996. pp. 1-28.

[BMO+98] BUSSO (E.P.), MEISSONNIER (F.), O'DOWD (N.P.), NOUAILHAS (D.), BERTRAM (A.) et SIDOROFF (F.) - Length scale effects on the geometric softening of precipitated single crystals – *Journal de physique IV*. 1998.

[BMO00] BUSSO (E.P), MEISSONNIER (F.T.) et O'DOWD (N.P.). – Gradient-dependant deformation of two-phase single crystals. *J. Mech. Phys. Sol.*, vol. 48, 2000, pp. 2333–2361.

[BP68] BAIN (E.C) et Paxton (H.W.). – *Les elements d'addition dans l'acier* – Paris, 1968.

[BP95] BECKER (R.) et PANCHANADEESWARAN (S.). – Effects of grain interactions on deformation and local texture in polycrystals. *Acta metall. mater.*, vol. 43, n7, 1995, pp. 2701–2719.

[BS52] BECK (J.) et SPERRY (P.R.). – Strain induced grain boundary migration in high purity aluminium. *J. Appl. Phys*, vol. 21, 150-152, p. 1950.

[BTHT02] BOUVIER (S.), TEODOSIU (C.), HADDADI (H.) et TABACARU (V.). – Anisotropic work-hardening behaviour of structural steels and aluminium alloys at large strains. *In : Proceeding of the Sixth European Mechanics of Materials Conference. Non linear mechanics of anisotropic materials*, éd. par CESCOTTO (S.), pp. 329–336.

[BUP+93] BIERMANN (H.), UNG'AR (T.), PFANNENMÜLLER (T.), HOFFMANN (G.), BORBELY (A.) et MUGHRABI (H.). – Local variations of lattice parameter and long-range internal stresses during cyclic deformation of polycrystalline copper. *Acta metall.*, vol. 41, n9, 1993, pp. 2743–2753.

[BZ79] BERVEILLER (M.) et ZAOUI (A.). – An extension to the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals. *J. Mech. Phys. Sol.*, vol. 26, 1979, pp. 325–344.

[CAI87] CAILLETAUD (G.). – *Une approche micromécanique phénoménologique du comportement inélastique des métaux*. – Thèse Université Paris 6, 1987.

[CG01] CERMELLI (P.) et GURTIN (M.). – On the characterization of geometrically necessary dislocations in finite plasticity. *J. Mech. Phys. Sol.*, vol. 49, 2001, pp. 1539–1568.

[CHO79] CHOMEL (Ph.) – *Adoucissement du fer à basse température par des éléments de substitution* - Thèse Université Paul Sabatier de Toulouse, 1979.

[CHR70] CHRISTIAN (J.W.). – *Martensite : fundamentals and technology* – Longmans, 1970.

[CHR01] CHRYSOCHOOS (A.). – Analyse de champs thermomécaniques par corrélation d'images et thermographie infrarouge. incidence sur l'identification des modèles de comportement. In : *Actes du congrès Mécamat, Aussois*, éd. par LICHT (C.), MABRU (C.) et PEYROUX (R.), pp. 44–50.

[DAN00] DANYLOVA (O.). – *Etude des relations microstructure/propriétés mécaniques des aciers bas carbone microalliés, en fonction des paramètres du traitement thermique et thermomécanique* – Thèse Institut National Des Sciences Appliquées de Lyon, 2000.

[DEL97] DELAIRE (F.). – *Simulation numérique du comportement élastoviscoplastique d'un multicristal. Validation numérique.* – Thèse Université Paris 13, 1997.

[DL99] DUGGAN (B.J.) et LIU (G.L.). – The formation of the fibre textures in B.C.C. metals by deformation banding. In : *Proceeding of the Twelfth International Conference on Textures of Materials*, éd. par SZPUNAR (J.A.), pp. 706–711.

[DOU00] DOUMALIN (P.). – *Microextensométrie locale par corrélation d'images appliquée aux études micromécaniques en utilisant le microscope électronique à balayage.* – Thèse Ecole Polytechnique, 2000.

[DRR00] DELAIRE (F.), RAPHANEL (J.L.) et REY (C.). – Plastic heterogeneities of a copper multicrystal deformed in uniaxial tension: experimental study and finite element simulations. *Acta mater.*, vol. 48, 2000, pp. 1075–1087.

[DSW67] DILLAMORE (I.L.), SMITH (C.J.E.) et WATSON (T.W.). – Oriented nucleation in the formation of annealing textures in iron. *Metal Sci.*, vol. 1, 1967, pp. 49–54.

[EH74] EVERY (R.L.) et HATHERLY (M.). – Oriented nucleation in low-carbon steels. *Texture*, vol. 1, 1974, pp. 183–194.

[EHBR00] ERIEAU (P.), HOC (T.), BIAUSSER (H.) et REY (C.). – Modelling heterogeneities and computation of stored energy distribution in an IF-Ti steel. In : *Proceeding of the 21st Risø International Symposium on Materials Science : Recrystallization – Fundamental Aspects and Relations to Deformation Microstructures*, éd. par HANSEN (N.), HUANG (X.), JUUL JENSEN (D.), LAURIDSEN (E.M.), LEFFERS (T.), PANTLEON (W.), SABIN (T.J.) et WERT (J.A.), pp. 339–344.

[EM79] ESSMAN (U.) et MUGRHABI (H.). – Annihilation of dislocations during tensile and cyclic deformation and limits of dislocation densities. *Phil. Mag.*, vol. A40, n6, 1979, pp. 731–756.

[EM84] ESTRIN (Y.) et MECKING (H.). – A unified phenomenological description of work hardening and creep based on one-parameter models. *Acta metall.*, vol. 32, n1, 1984, pp. 57–70.

[EP99] ERIEAU (P.) et PILVIN (P.). – *Utilisation de modèles de comportement hiérarchiques pour la simulation de la mise en forme de matériaux métalliques.* – Rapport technique, Stage de DEA Mécanique et Matériaux, Ecole Centrale Paris, 1999.

[ER02] ERIEAU (Ph.) et REY (C.). – *Finite Element simulations and experimental validation of the local texture of an IF steel aggregate submitted to plane strain compression*. – Euromech-mecamat, Proceedings of the sixth European Mechanics of Material Conference (EMMC6), Non linear Mechanics of anisotropic Materials, University of Liege-Belgium, September 9-12, , pp289-296, 2002, Editor S. Cescotto.

[ERI03].ERIEAU (P.). – *Etude expérimentale et analyse numérique de l'influence des hétérogénéités induites par la déformation à froid sur la recristallisation primaire d'un acier if-ti*. Thèse Ecole Centrale Paris, 2003.

[ETMB98] ESTRIN (Y.), T'OTH (L.S.), MOLINARI (A.) et BRECHET (Y.). – A dislocation based model for all hardening stages in large strain deformation. *Acta mater.*, vol. 46, 1998, pp. 5509–5522.

[FAN01] FANDEUR (O.). – *Etude expérimentale et modélisation mécanique de la corrosion sous contrainte des gaines en zircaloy 4*. – Thèse Ecole Centrale Paris, 2001.

[FIV93] FIVEL (M.). – *Etudes numériques à différentes échelles de la déformation plastique des monocristaux de structure CFC*. – Thèse Institut National Polytechnique de Grenoble, 1993.

[FOR96] FOREST (S.). – *Mechanical modeling of non homogeneous deformation of single crystals*. – Thèse Ecole des Mines de Paris, 1996.

[FOR99] FOREST (S.). – *Lois de comportement inélastiques en transformations finies*. – Rapport technique, Cours de DEA Mécanique et Matériaux, 1999.

[FP99] FOREST (S.) et PILVIN (P.). – Modelling finite deformation of polycrystals using local objective frames. *Z. Angew. Math. Mech.*, vol. 79, 1999, pp. 199–202.

[FPZ93] FRANCOIS (D.), PINEAU (A.) et ZAOUI (A.). – *Comportement mécanique des matériaux : Tome I*. – Hermes, 1993.

[FRA78] FRANCIOSI (P.). – *Plasticité à froid des monocristaux CFC : étude du durcissement latent*. – Thèse Université Paris 7, 1978.

[FRA83] FRANCIOSI (P.). – Glide mechanisms in B.C.C. crystals: an investigation of the case of  $\alpha$ -iron through multislip and latent hardening tests. *Acta metall*, vol. 31, n9, 1983, pp. 1331–1342.

[FRA84] FRANCIOSI (P.). – *Etude théorique et expérimentale du comportement élastoplastique des monocristaux métalliques se déformant par glissement : modélisation pour un chargement complexe quasi statique*. – Thèse Université Paris 13, 1984.

[FRE01] FRENOIS (S.). – *Modélisation polycristalline du comportement mécanique du tantale. Application à la mise en forme par hydroformage*. – Thèse Ecole Centrale Paris, 2001.

[FRI64] FRIEDEL (J.). – *Dislocations*. – Pergamon Press, 1964.

- [GIL93] GIL SEVILLANO (J.). – Flow stress and work hardening. *In : Material Science and Technology. A comprehensive treatment*, éd. par CAHN (R.W.), HAASEN (P.) et KRAMER (E.J.), pp. 19–88. – 1993.
- [GOU99] GOUIN (H.). – Etude d'un critère de dimensionnement d'un acier 316L irradié représenté par un matériau écroui - Thèse Université Paris XIII, 1999.
- [GRI74] GRIMMER (H.). – Disorientations and coincidence rotations for cubic lattices. *Acta Cryst.*, vol. A30, 1974, pp. 685–688.
- [GTDC99] GRADEL (T.), TABOUROT (L.), DUMOULIN (S.) et CASTELNAU (O.). – Plastic behaviour simulation of an Al 99.5 coarse grain multycrystal during a tensile test. *In : Advances in mechanical behaviour, plasticity and damage*, éd. par MIANNAY (D.), COSTA (P.), FRANCOIS (D.) et PINEAU (A.), pp. 317–322.
- [GU88] GROMA (I.) et UNG'AR (T.). – Asymmetric X-ray line broadening of plastically deformed crystals. I. theory. *J. Appl. Cryst.*, vol. 21, 1988, pp. 47–53.
- [GVA81] GIL SEVILLANO (J.), VAN HOUTTE (P.) et AERNOUDT (E.). – *Large strain work hardening and textures*. – Pergamon Press, 1981, *Progress in Materials Science*, volume 25, 69–412p.
- [HAN90] HANSEN (N.). – Cold deformation microstructures. *Materials Science and Technology*, vol. 6, 1990, pp. 1039–1047.
- [HAU02] HAUŠILD (P.). – *Transition ductile-fragile dans un acier faiblement allié* - Thèse Ecole Centrale Paris, 2002.
- [HDA88] HARREN (S.V.), DEVE (H.E.) et ASARO (R.J.). – Shear band formation in plane strain compression. *Acta metall.*, vol. 36, n9, 1988, pp. 2435–2480.
- [HH67] HOOK (R.E.) et HIRTH (J.P.). – The deformation behavior of isoaxial bicrystals of Fe-3% Si. *Acta metall.*, vol. 15, 1967, pp. 535–576.
- [HH00] HUGHES (D.A.) et HANSEN (N.). – Microstructure and strength of nickel at large strains. *Acta mater.*, vol. 48, 2000, pp. 2985–3004.
- [HIL50] HILL (R.). – *The mathematical theory of plasticity*. – Oxford University Press, 1950.
- [HIL65] HILL (R.). – Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *J. Mech. Phys Sol.*, vol. 13, 1965, pp. 89–101.
- [HOC99] HOC (T.). – *Etudes expérimentale et numérique de la localisation lors de changements de trajets dans un acier doux*. – Thèse Ecole Centrale Paris, 1999.
- [HR00] HOC (T.) et REY (C.). – Effect of the free surface on strain localization in mild steel. *Scripta mater.*, vol. 42, 2000, pp. 1053–1058.

[HRR00] HOC (T.), REY (C.) et RAPHANEL (J.L.). – Experimental and numerical analysis of localization during sequential test for an IF-Ti steel. *Acta mater.*, vol. 48, 2000, pp. 4893–4900.

[HRRR00] HODOWANY (J.), RAVICHANDRAN (G.), ROSAKIS (A.J.) et ROSAKIS (P.). – Partition of plastic work into heat and stored energy. *Experimentals Mechanics*, vol. 40, n2, june 2000, pp. 113–123.

[HRV00] HOC (T.), REY (C.) et VIARIS DE LESENGO (P.). – Mesostructure of the localization in prestrained mild steel. *Scripta mater.*, vol. 42, 2000, pp. 749–754.

[HU62] HU (H.). – *AIME Trans.*, vol. 224, 1962, p. 75.

[HUG00] HUGHES (T.J.R.). – *The finite element method. Linear static and dynamic finite element analysis.* – Dover Publications, 2000.

[JAO65] JAOUL (B.). – *Etude la plasticité et application aux métaux.* – Dunod, 1965.

[JG60] JAOUL (B.) et GONZALEZ (D.). – Déformation plastique de monocristaux de fer. *J. Mech. Phys. Sol.*, vol. 9, 1960, pp. 16–38.

[JH86] JAGO (R.A.) et HANSEN (N.). – Grain size effects in the deformation of polycrystalline iron. *Acta metall.*, vol. 34, n9, 1986, pp. 1711–1720.

[KAN93] KANTIDIS (E.). – *Rupture fragile intergranulaire d'un acier faiblement allié, approches globale et locale* - Thèse Ecole des Mines de Paris, 1993.

[KBT01] KOK (S.), BEAUDOIN (A.J.) et TORTORELLI (D.A.) - Numerical integration of lattice rotation in polycrystal plasticity – *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. vol. 52 (12). 2001. pp. 1487-1500.

[KBT02] KOK (S.), BEAUDOIN (A.J.) et TORTORELLI (D.A.). – On the development of stage IV hardening using a model based on the mechanical threshold. *Acta mater.*, vol. 50, 2002, pp. 1653–1667.

[KD55] KOH (P.K.) et DUNN (C.G.). – Cold-rolled textures of silicon-iron crystals. *A.I.M.E. Trans.*, february 1955, pp. 401–406.

[KEH65] KEH (A.S.). – Work hardening and deformation sub-structure in iron single crystals deformed in tension at 298 K. *Phil. Mag.*, vol. A12, 1965, pp. 9–30.

[KN67] KEH (A.S.) et NAKADA (Y.). – Plasticity of iron single crystals. *Canadian Journal of Physics*, vol. 45, 1967, pp. 1101–1120.

[KN68] KEH (A.S.) et NAKADA (Y.). – Yielding, plastic flow and dislocation substructure in iron single crystals. *Trans. JIM*, vol. 9, supplement, 1968, pp. 876–884.

[KOC76] KOCKS (U.F.). – Laws for work-hardening and low-temperature creep. *J. Eng. Mat. Tech.*, january 1976, pp. 76–85.

[KS69] KOCKS (U.F.) et SCATTERGOOD (R.O.). – Elastic interactions between dislocations in a finite body. *Acta metall.*, vol. 17, n9, 1969, pp. 1161–1168.

[KSB+00] KARAMAN (I.), SEHITOGLU (H.), BEAUDOIN (A.J.), CHUMLYAKOV (Y.I.), MAIER (H.J.) et TOME (C.N.) - Modeling the deformation behavior of Hadfield steel single and polycrystals due to twinning and slip – *Acta materialia*. vol. 48 (9). 2000. pp. 2031-2047.

[KW62] KEH (A.S.) et WEISMANN (S.). – Deformation substructure in body-centered cubic metals. In : *Electron microscopy and strength of crystals, Proceeding of the 1<sup>st</sup> Berkeley congress*, éd. par THOMAS (G.) et WASHBURN (J.), pp. 231–300.

[KW70] KUHLMANN-WILSDORF (D.). – A critical test on theories of work hardening for the case of drawn iron wire. *Metall. Trans.*, vol. 1, november 1970, pp. 3173–3179.

[KW89] KUHLMANN-WILSDORF (D.). – Theory of plastic deformation: properties of low energy dislocation structures. *Mater. Sci. Eng.*, vol. A113, 1989, pp. 1–41.

[KW99] KUHLMANN-WILSDORF (D.). – ”regular” deformation bands (DBs) and the LEDS hypothesis. *Acta mater.*, vol. 47, n6, 1999, pp. 1697–1712.

[LBJ00] LILLYWHITE (S.J.), BATE (P.S.) et JUUL JENSEN (D.). – Distribution of crystallographic orientations in a deformed aluminium bicrystal. In : *Proceeding of the 21st Risø International Symposium on Materials Science: Recrystallization – Fundamental Aspects and Relations to Deformation Microstructure*, éd. par HANSEN (N.), HUANG (X.), JUUL JENSEN (D.), LAURIDSEN (E.M.), LEFFERS (T.), PANTLEON (W.), SABIN (T.J.) et WERT (J.A.), pp. 415–420.

[LC96] LEMAITRE (J.) et CHABOCHE (J.L.). – *Mécanique des matériaux solides*. – Dunod, 1996.

[LD93] LEE (C.S.) et DUGGAN (B.J.). – Deformation banding and copper-type rolling textures. *Acta metall. mater.*, vol. 41, n9, 1993, pp. 2691–2699.

[LEE81] LEE (E.H.). – Some comments on elastic-plastic analysis. *Int. J. Sol. Struct.*, vol. 17, 1981, pp. 859–872.

[LEF95] LEFFERS (T.). – Long-range stresses associated with boundaries in deformed metals. *phys. stat. sol. (a)*, vol. 149, 1995, pp. 69–84.

[LEM95] LEMOINE (X.). – *Analyse micromécanique de la déformation des cellules de dislocations et conséquences sur le comportement des aciers*. – Thèse Université de Metz, 1995.

[LES00] LESNE (L.). – *Etude des mécanismes de recristallisation dans les fer de ultra-haute pureté dopé en carbone, manganèse et phosphore*. – Thèse Institut National Polytechnique de Grenoble, 2000.

[LGD93] LIM (E.), GREENE (G.W.) et DUGGAN (B.J.). – Strain and temperature dependence of deformation banding. *In : Proceeding of the tenth International Conference on Textures of Materials*, éd. par BUNGE (H.J.), pp. 801–806.

[LIN97] LINEAU (C.). – *Analyse expérimentale de la déformation plastique d'un polycristal d'acier. Comparaison avec les simulations de modèles polycristallins.* – Thèse Ecole nationale des Ponts et Chaussées, 1997.

[LIP89] LIPINSKI (P.). – *Modélisation du comportement des métaux, en transformations élasto-plastiques finies à partir des méthodes de transition d'échelle.* – Thèse Institut Supérieur de Génie Mécanique et Productique de Metz, 1989.

[LK79] LOUCHET (F.) et KUBIN (L.P.). – *In situ* deformation of B.C.C. crystals at low temperatures in a high-voltage electron microscope dislocation mechanisms and strainrate equation. *Phil. Mag.*, vol. A39, n4, 1979, pp. 433–454.

[LKD92] LAN (Y.), KLAAR (H.J.) et DAHL (W.). – Evolution of dislocation structures and deformation behavior of iron at different temperatures : Part 1. strain hardening curves and cellular structure. *Metall. trans.*, vol. 23A, 1992, pp. 537–544.

[LMA63] LESLIE (W.C.), MICHALAK (J.T.) et AUL (F.W.). – *In : Iron and its dilute solid solutions*, éd. par Spencer et Werner, p. 119. – Intersciences, 1963.

[LRV97] LINEAU (C.), REY (C.) et VIARIS DE LESENCO (P.). – Experimental analysis of plastic deformation of steel grains. comparison with polycrystal model predictions. *Mater. Sci. Eng.*, vol. A234, 1997, pp. 853–856.

[MAN73] MANDEL (J.). – Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques. *Int. J. Sol. Struct.*, vol. 9, 1973, pp. 725–740.

[MAN82] MANDEL (J.). – Définition d'un repère privilégié pour l'étude des transformations anélastiques du polycristal. *Journal de Mécanique théorique et appliquée*, vol. 1, n1, 1982, pp. 7–23.

[MB95] MANDAL (D.) et BAKER (I.). – Measurement of the energy of grain boundary geometrically-necessary dislocations in copper. *Scripta metall. et mater.*, vol. 33, n5, 1995, pp. 831–836.

[MB00] MOHAMED (G.) et BACROIX (B.). – Role of stored energy in static recrystallization of cold rolled copper single and multicrystals. *Acta mater.*, vol. 48, 2000, pp. 3295–3302.

[MBO01] MEISSONNIER (F.T.), BUSSO (E.P.) et O'DOWD (N.P.) - Finite element implementation of a generalised non-local rate-dependent crystallographic formulation for finite strains – *International Journal of Plasticity*. vol. 17 (4). 2001. pp. 601-640.

[MD99] MIKA (D.P.) et DAWSON (P.R.). – Polycrystal plasticity modeling of intracrystalline boundary textures. *Acta mater.*, vol. 47, n4, 1999, pp. 1355–1369.

[ME73] Mc MAHON (J.A.) et THOMAS (G.). – *Development of economical, though, ultra high strength Fe-Cr-C steels* – Cambridge, 1973.

[MIR99] MIROUX (A.). – *Etude expérimentale et modélisation des mécanismes de formation des textures de recristallisation dans les aciers sans interstitiels stabilisés au titane.* – Thèse Université Paris 13, 1999.

[MK81] MECKING (H.) et KOCKS (U.F.). – Kinetics of flow and strain hardening. *Acta metall.*, vol. 29, 1981, pp. 1865–1875.

[MOH99] MOHAMED (G.). – *Caractérisation de l'énergie stockée par diffraction des rayons X dans les multicristaux de cuivre. Effet sur la recristallisation statique.* – Thèse Université Paris 13, 1999.

[MUG88] MUGHRABI (H.). – Dislocation clustering and long-range internal stresses in monotonically and cyclically metal crystals. *Revue Phys. Appl.*, vol. 23, 1988, pp. 367–379.

[NAU99] NAUDIN (C.). – *Modélisation de la ténacité de l'acier de cuve REP en présence de zones de segregation* - Thèse Ecole des Mines de Paris, 1999.

[NES95] NES (E.). – Recovery revisited. *Acta metall. mater.*, vol. 43, n6, 1995, pp. 2189–2207.

[NLB+00] NIELSEN (S.F.), LUDWIG (W.), BELLET (D.), LAURIDSEN (E.M.), POULSEN (H.F.) et JUUL JENSEN (D.). – Three dimensional mapping of grain boundaries. In : *Proceeding of the 21st Risø International Symposium on Materials Science : Recrystallization - Fundamental Aspects and Relations to Deformation Microstructure*, éd. par HANSEN (N.), HUANG (X.), JUUL JENSEN (D.), LAURIDSEN (E.M.), LEFFERS (T.), PANTLEON (W.), SABIN (T.J.) et WERT (J.A.), pp. 473–478.

[ONI03] ONIMUS (F.) - *Approche expérimentale et modélisation micromécanique du comportement des alliages de zirconium irradiés* - Thèse Ecole Centrale Paris, 2003.

[OWB83] ÖSTERLE (W.), WEVER (H.) et BUNGE (H.J.). – Development of microstructure and texture of cold rolled *ff* iron. *Metal Sci.*, vol. 17, july 1983, pp. 333–340.

[PA84] PRINZ (F.B.) et ARGON (A.S.). – The evolution of plastic flow resistance in large strain flow of single phase subgrain forming metals. *Acta metall.*, vol. 32, n 7, 1984, pp. 1021–1028.

[PAN83] PEIRCE (D.), ASARO (R.J.) et NEEDLEMAN (A.). – Material rate dependance and localized deformation in crystalline solids. *Acta metall.*, vol. 31, 1983, pp. 1951–1976.

[PE92] PORTER (D.A.) et EASTERLING (K.E.). – *Phase transformations in metals and alloys* – London, 1992.

[PED87] PEDERSEN (O. B.). – The flow stress of copper. *Acta metall.*, vol. 35, n10, 1987, pp. 2567–2581.

[PIL98] PILVIN (P.). – SiDoLo *version 2.4, Notice d'utilisation*. – Rapport technique, Ecole Centrale Paris, 1998.

[PPL75] POLLNOW (D.), PENELLE (R.) et LACOMBE (P.). – Relations entre les propriétés plastiques et la microstructure de monocristaux de fer déformés par traction à la température ambiante. *Mém. Sci. Rev. Métall.*, juin 1975, pp. 491–503.

[PVBC98] PHILIBERT (J.), VIGNES (A.), BRECHET (Y.) et COMBRADE (P.). – *Métallurgie : du minerai au matériau*. – Masson, 1998.

[RAO99] RAOUL (S.) – *Rupture intergranulaire fragile d'un acier faiblement allié induite par la ségrégation d'impuretés aux joints de grains : Influence de la microstructure*. – Thèse Université Paris XI, 1999.

[RAU93] RAUCH (E.F.). – *Etude de l'écroûissage des métaux - Aspects microstructuraux et lois de comportement*. – Thèse Institut National Polytechnique de Grenoble, 1993.

[RE00] RANDLE (V.) et ENGLER (O.). – *Introduction to texture analysis, macrotecture, microtexture and orientation mapping*. – Gordon and Breach Science, 2000.

[REY88] REY (C.). – Effects of grain boundaries on the mechanical behaviour of grains in polycristals. *Revue Phys. Appl.*, vol. 23, avril 1988, pp. 491–500.

[RHJ96] RANDLE (V.), HANSEN (N.) et JUUL JENSEN (D.). – The deformation behaviour of grain boundary regions in polycrystalline aluminium. *Phil. Mag.*, vol. A73, n2, 1996, pp. 265–282.

[RÖN79] RÖNNPAGEL (D.). – A new method of deformation calorimetry. *J. Phys. E :Sci. Instrum.*, vol. 12, 1979, pp. 409–417.

[RN84] ROVEN (H.J.) et NES (E.). – Structure and properties of heavily cold rolled iron and high strength low alloy and low carbon steels. *Metal Sci.*, vol. 18, n11, 1984, pp. 515–520.

[RS50] READ (W.T.) et SHOCKLEY (W.). – Dislocation models of crystal grain boundaries. *Phys. Rev.*, vol. 78, n3, 1950, pp. 275–289.

[RS78a] RÖNNPAGEL (D.) et SCHULZ (G.). – A new method of deformation calorimetry applied to copper single crystals. *Thermochimica Acta*, vol. 22, 1978, pp. 289–302.

[RZ80] REY (C.) et ZAOUI (A.). – Slip heterogeneities in deformed aluminium bicrystals. *Acta metall.*, vol. 28, 1980, pp. 687–697.

[RZ82] REY (C.) et ZAOUI (A.). – Grain boundary effects in deformed bicrystals. *Acta metall.*, vol. 30, 1982, pp. 523–535.

[SD96] SARMA (G.B.) et DAWSON (P.R.). – Effects of interactions among crystals on the inhomogeneous deformations of polycrystals. *Acta mater.*, vol. 44, n5, 1996, pp. 1937–1953.

- [SK70a] SPITZIG (W.A.) et KEH (A.S.). – Orientation dependence of the strain-rate sensitivity and thermally activated flow in iron single crystals. *Acta metall.*, vol. 18, 1970, pp. 1021–1033.
- [SK70b] SPITZIG (W.A.) et KEH (A.S.). – The role of internal and effective stresses in the plastic flow of iron single crystals. *Metall. Trans.*, vol. 1, 1970, pp. 3325–3331.
- [SB89] SMELSER (R.E.) et BECKER (R.). – *ABAQUS User Subroutines for Material Modelling* -, 1989
- [SRZ98] SARMA (G.B.), RADHAKRISHNAN (B.) et ZACHARIA (T.). – Finite element simulations of cold deformation at the mesoscale. *Computational Materials Science*, vol. 12, 1998, pp. 105–123.
- [ST01] SOLAS (D.E.) et TOM (C.N.). – Texture and strain localization prediction using a N-site polycrystal model. *Int. J. Plas.*, vol. 17, 2001, pp. 737–753.
- [SVV98] SAMAJDAR (I.), VERLINDEN (B.) et VAN HOUTTE (P.). – Developments in macro and micro texture during plane strain channel die compression of IF steel. *ISIJ Inter.*, vol. 38, n7, 1998, pp. 759–765.
- [TAB92] TABOUROT (L.). – *Loi de comportement élastoviscoplastique du monocristal en grandes déformations*. – Thèse Institut National Polytechnique de Grenoble, 1992.
- [TAY38] TAYLOR (G.I.). – Plastic strains in metals. *J. Inst. Met.*, vol. 62, 1938, pp. 307–324.
- [TE26] TAYLOR (G.I.) et ELAM (C.F.). – The distortion of iron crystals. *Proc. Roy. Soc.*, vol. A118, 1926, pp. 337–361.
- [TME01] T'OTH (L.S.), MOLINARI (A.) et ESTRIN (Y.). – Strain hardening at large strains as predicted by a dislocation based polycrystal model. *J. Eng. Mat. Techn. Micromechanics*, vol. Special Issue, 2001.
- [TRT91] TEODOSIU (C.), RAPHANEL (J.L.) et TABOUROT (L.). – Finite implementation of the large elastoplastic deformation of multicrystals. In : *Large Plastic Deformation, Proc. int. seminar MECAMAT'91*, éd. par TEODOSIU (C.), RAPHANEL (J.L.) et SIDOROFF (F.), pp. 153–168.
- [UH89] USHIODA (K.) et HUTCHINSON (W.B.). – Role of shear bands in annealing texture formation in 3%Si-Fe (111)[112] single crystals. *ISIJ Inter.*, vol. 29, n10, 1989, pp.862–867.
- [WGLL01] WU (G.L.), GODFREY (A.), LIU (W.) et LIU (Q.). – Macroscopic subdivision of columnar grain aluminium with  $f_{001g} < uv0 >$  orientations following low strain deformation. *Scripta mater.*, vol. 45, n10, 2001, pp. 1117–1122.
- [WIL70] WILKENS (M.). – The determination of density and distribution of dislocations in deformed single crystals from broadened x-ray diffraction profiles. *Phys. Stat. Sol. (a)*, vol. 2, 1970, pp. 359–370.

[YAH97] YAHYA (O.M.L.). – Approche locale de la rupture fragile intergranulaire de l'acier 16MND5 - Thèse Ecole des Mines de Paris, 1997.

[ZAO90] ZAOUI (A.). – Comportement global des polycristaux : passage du monocristal au polycristal. *In : Physique et mécanique de la mise en forme des métaux, école d'été d'Oléron*, éd. par MOUSSY (F.) et FRANCIOSI (P.), pp. 337–351.



## ANNEXE I

### 1. Asymétrie du glissement

Systèmes de glissement faciles 'twining'			Systèmes de glissement difficiles 'anti-twining'		
Normale au plan de glissement	Direction de glissement	Système de glissement	Normale au plan de glissement	Direction de glissement	Système de glissement
$[\bar{2} \bar{1} \bar{1}]$	$[\bar{1} 11]$	2'A <sub>f</sub>	$[\bar{2} \bar{1} \bar{1}]$	$[1 \bar{1} \bar{1}]$	2'A <sub>d</sub>
$[12\bar{1}]$	$[\bar{1} 11]$	3'A <sub>f</sub>	$[12\bar{1}]$	$[1 \bar{1} \bar{1}]$	3'A <sub>d</sub>
$[1\bar{1}2]$	$[\bar{1} 11]$	6'A <sub>f</sub>	$[1\bar{1}2]$	$[1 \bar{1} \bar{1}]$	6'A <sub>d</sub>
$[2\bar{1}\bar{1}]$	$[111]$	2''B <sub>f</sub>	$[2\bar{1}\bar{1}]$	$[\bar{1} \bar{1} \bar{1}]$	2''B <sub>d</sub>
$[\bar{1}2\bar{1}]$	$[111]$	4'B <sub>f</sub>	$[\bar{1}2\bar{1}]$	$[\bar{1} \bar{1} \bar{1}]$	4'B <sub>d</sub>
$[\bar{1}\bar{1}2]$	$[111]$	5'B <sub>f</sub>	$[\bar{1}\bar{1}2]$	$[\bar{1} \bar{1} \bar{1}]$	5'B <sub>d</sub>
$[\bar{2} 1 \bar{1}]$	$[\bar{1} \bar{1} 1]$	1'C <sub>f</sub>	$[\bar{2} 1 \bar{1}]$	$[11\bar{1}]$	1'C <sub>d</sub>
$[1\bar{2} \bar{1}]$	$[\bar{1} \bar{1} 1]$	3''C <sub>f</sub>	$[1\bar{2} \bar{1}]$	$[11\bar{1}]$	3''C <sub>d</sub>
$[112]$	$[\bar{1} \bar{1} 1]$	5''C <sub>f</sub>	$[112]$	$[11\bar{1}]$	5''C <sub>d</sub>
$[21\bar{1}]$	$[1\bar{1}\bar{1}]$	1''D <sub>f</sub>	$[21\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	1''D <sub>d</sub>
$[\bar{1} \bar{2} \bar{1}]$	$[1\bar{1}\bar{1}]$	4''D <sub>f</sub>	$[\bar{1} \bar{2} \bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	4''D <sub>d</sub>
$[\bar{1} 12]$	$[1\bar{1}\bar{1}]$	6''D <sub>f</sub>	$[\bar{1} 12]$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	6''D <sub>d</sub>

Tableau AI-1 : Définition des systèmes de glissement orientés de la famille  $\{112\}\langle 111\rangle$ .

### 2-Notation de Schmid et Boas

Une notation pratique a été proposée par Schmid et Boas pour les systèmes de glissement. Dans le cas d'un monocristal en traction ou compression, la nature du premier système de glissement actif dépend de la position de l'axe de la sollicitation dans le triangle stéréographique standard, comme le montre la figure 4. On note que, le triangle élémentaire est partagé en trois sous-domaines. Dans chacun d'eux un seul système de glissement possède le facteur d'orientation maximal.

N°	Plan de glissement	Direction de glissement	Système de glissement	N°	Plan de glissement	Direction de glissement	Système de glissement
1	$(0\bar{1}1)$	$[\bar{1}11]$	2A	13	$(011)$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	1C
2	$(101)$	$[\bar{1}11]$	3A	14	$(101)$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	3C
3	$(110)$	$[\bar{1}11]$	6A	15	$(\bar{1}10)$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	5C

4	$(\bar{2}\bar{1}\bar{1})$	$[\bar{1}11]$	2'A	16	$(\bar{2}1\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	1'C
5	$(12\bar{1})$	$[\bar{1}11]$	3'A	17	$(1\bar{2}\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	3''C
6	$(1\bar{1}2)$	$[\bar{1}11]$	6'A	18	$(112)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	5''C
7	$(0\bar{1}1)$	$[111]$	2B	19	$(011)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	1D
8	$(\bar{1}01)$	$[111]$	4B	20	$(\bar{1}01)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	4D
9	$(\bar{1}10)$	$[111]$	5B	21	$(110)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	6D
10	$(2\bar{1}\bar{1})$	$[111]$	2''B	22	$(21\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	1''D
11	$(\bar{1}2\bar{1})$	$[111]$	4'B	23	$(\bar{1}\bar{2}\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	4''D
12	$(\bar{1}\bar{1}2)$	$[111]$	5'B	24	$(\bar{1}12)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	6''D

Tableau AI-2 : Notation étendue de SCHMID et BOAS pour la structure cubique centrée, appliquée aux systèmes de glissement des familles  $\{110\} \langle 111 \rangle$  et  $\{112\} \langle 111 \rangle$ .

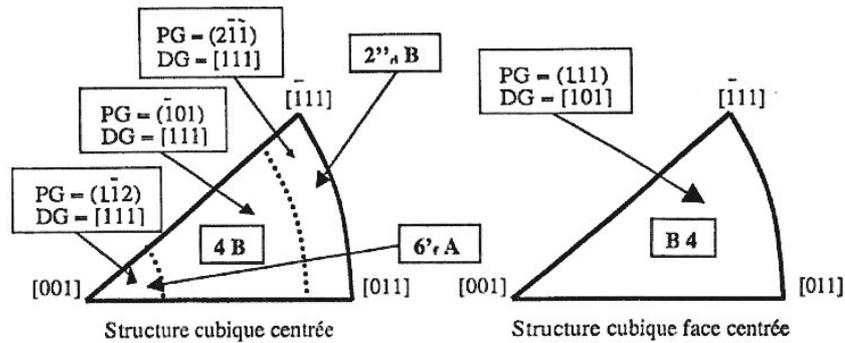


Figure AI-1 : Domaine d'activation initial pour les structures c.c, représenté sur un triangle élémentaire standard de la projection stéréographique d'axe  $\langle 001 \rangle$  avec hypothèse des cisssions critiques initiales identiques.

ANNEXE II  
Correspondance systèmes de glissement, densités de dislocations et  
quantité de glissement

Plan de glissement	Direction de glissement	Densité de dislocations	Quantité de glissement	Plan de glissement	Direction de glissement	Densité de dislocations	Quantité de glissement
$(0\bar{1}1)$	$[\bar{1}11]$	SDV1	SDV34	$(011)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	SDV13	SDV46
$(101)$	$[\bar{1}11]$	SDV2	SDV35	$(101)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	SDV14	SDV47
$(110)$	$[\bar{1}11]$	SDV3	SDV36	$(\bar{1}10)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	SDV15	SDV48
$(\bar{2}\bar{1}\bar{1})$	$[\bar{1}11]$	SDV4	SDV37	$(\bar{2}\bar{1}\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	SDV16	SDV49
$(12\bar{1})$	$[\bar{1}11]$	SDV5	SDV38	$(1\bar{2}\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	SDV17	SDV50
$(1\bar{1}2)$	$[\bar{1}11]$	SDV6	SDV39	$(112)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	SDV18	SDV51
$(0\bar{1}1)$	$[111]$	SDV7	SDV40	$(011)$	$[1\bar{1}1]$	SDV19	SDV52
$(\bar{1}01)$	$[111]$	SDV8	SDV41	$(\bar{1}01)$	$[1\bar{1}1]$	SDV20	SDV53
$(\bar{1}10)$	$[111]$	SDV9	SDV42	$(110)$	$[1\bar{1}1]$	SDV21	SDV54
$(2\bar{1}\bar{1})$	$[111]$	SDV10	SDV43	$(21\bar{1})$	$[1\bar{1}1]$	SDV22	SDV55
$(\bar{1}2\bar{1})$	$[111]$	SDV11	SDV44	$(\bar{1}\bar{2}\bar{1})$	$[1\bar{1}1]$	SDV23	SDV56
$(\bar{1}\bar{1}2)$	$[111]$	SDV12	SDV45	$(\bar{1}12)$	$[1\bar{1}1]$	SDV24	SDV57



## ANNEXE III

Cartographies de déformations et de contraintes pour la bainite  $600 \times 200 \mu\text{m}^2$  une seule couche pour une elongation de 9%

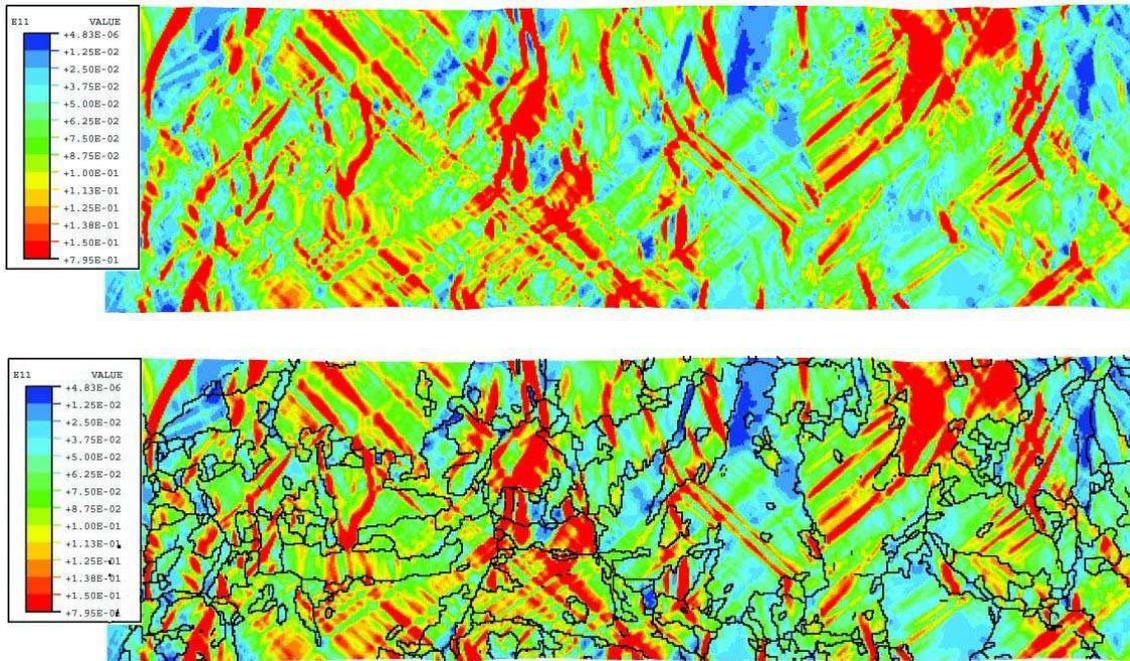


Figure AIII-1 : Cartographie  $E_{11}$ .

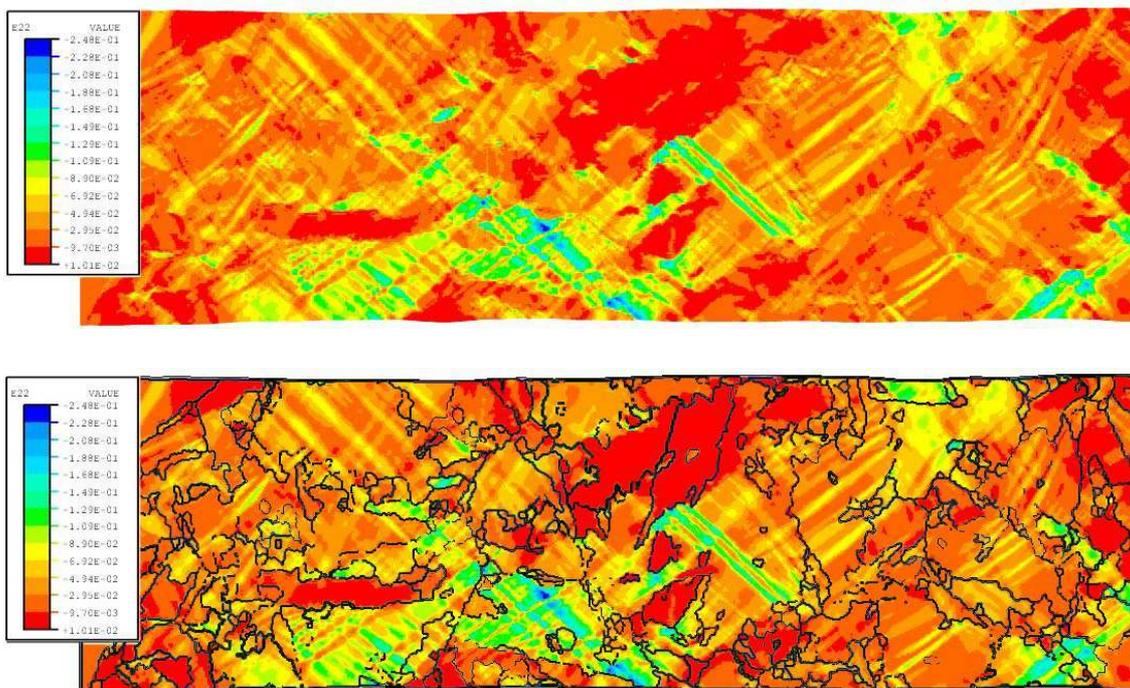


Figure AIII-2 : Cartographie  $E_{22}$ .

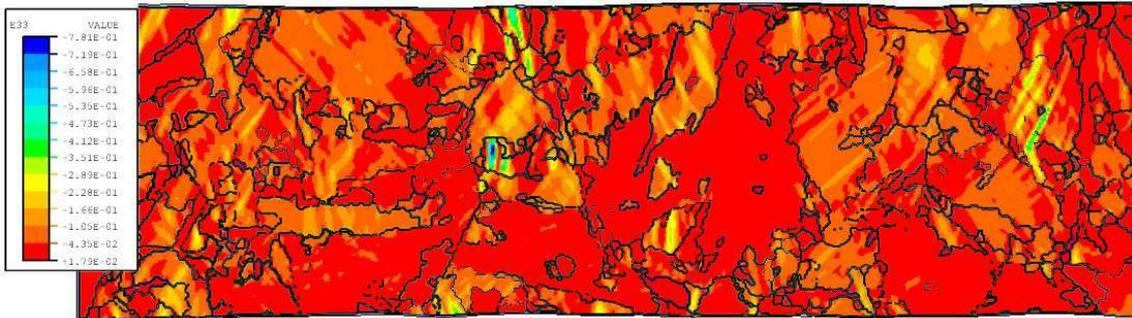
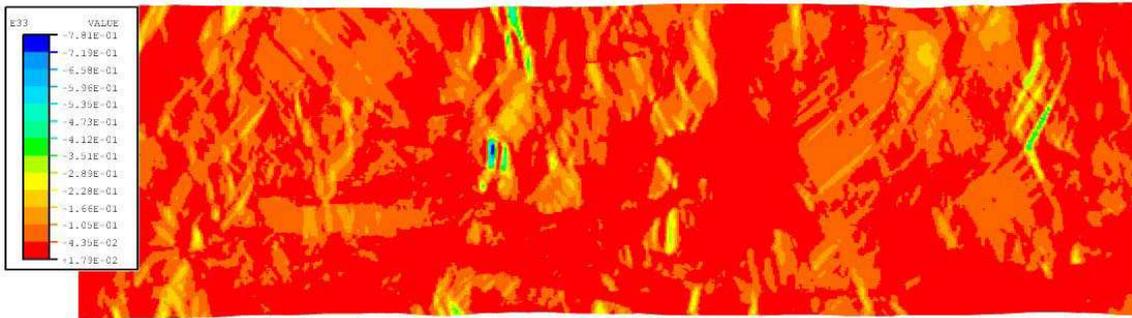


Figure AIII-3 : *Cartographie E33.*

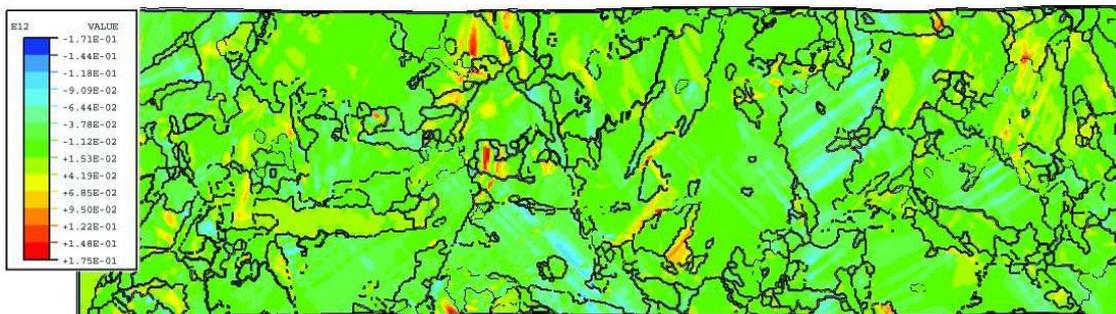
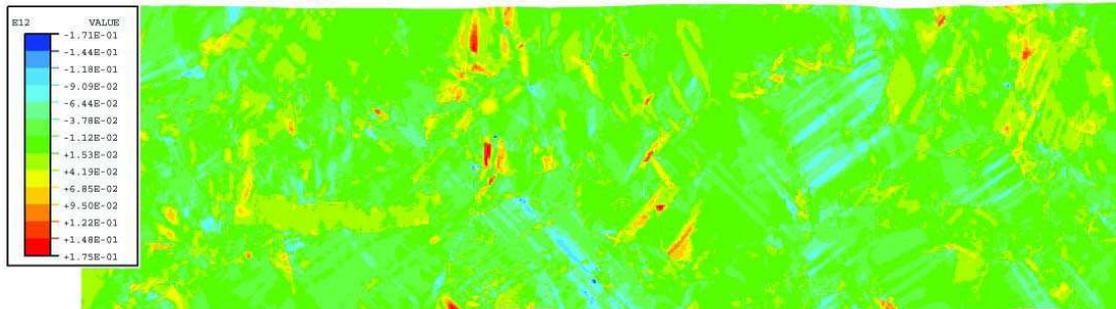


Figure AIII-4 : *Cartographie E12.*

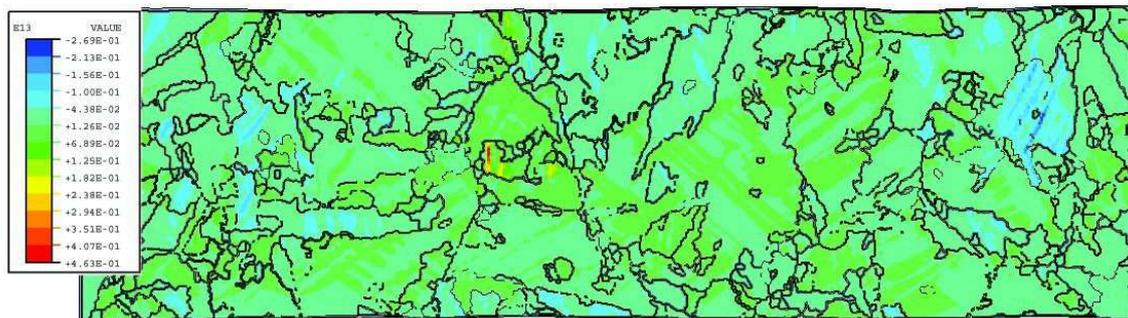
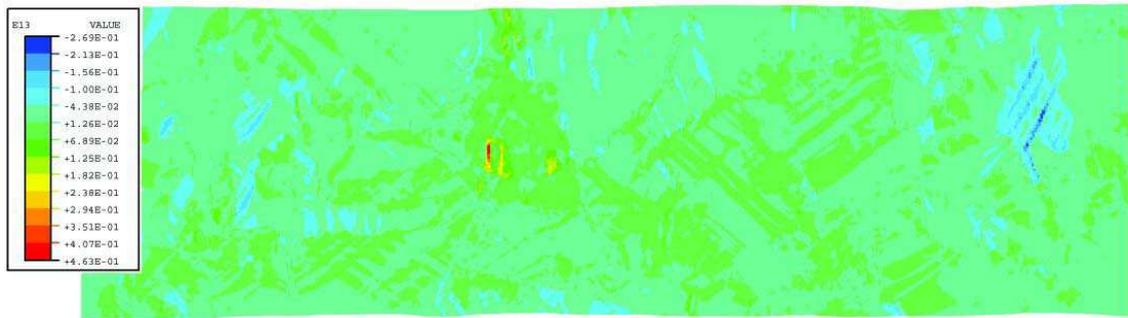


Figure AIII-5 : Cartographie E13.

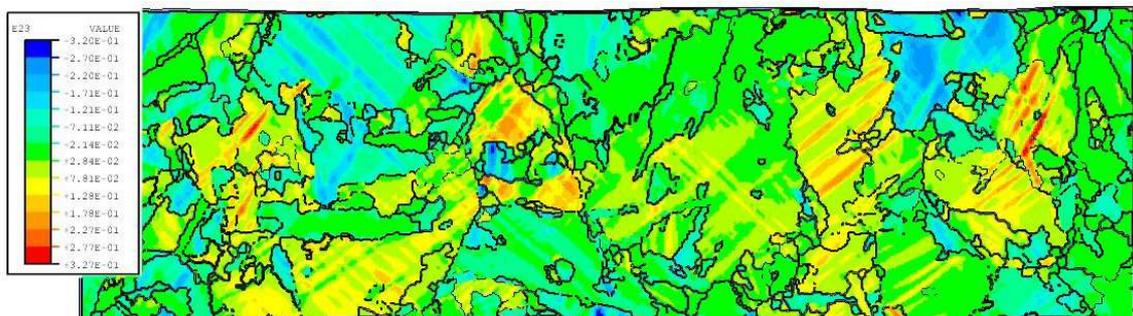
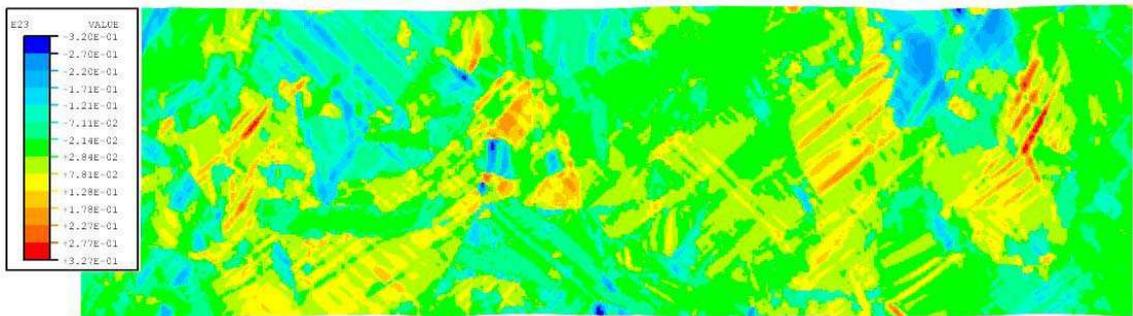


Figure AIII-6 : Cartographie E23.

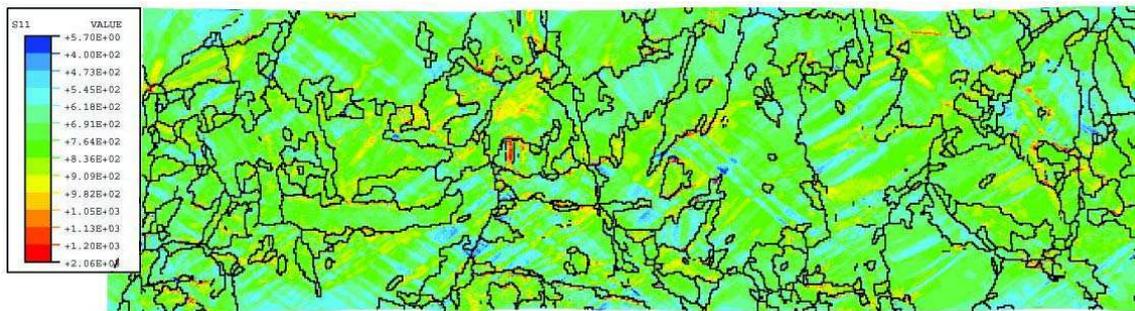
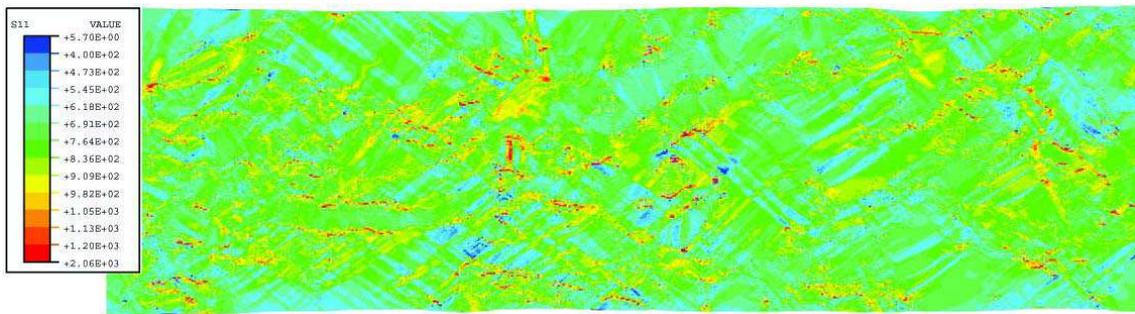


Figure AIII-7 : Cartographie S11.

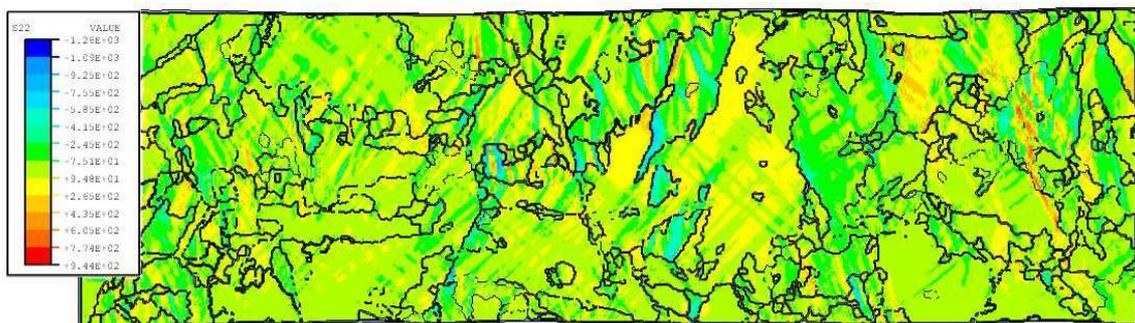
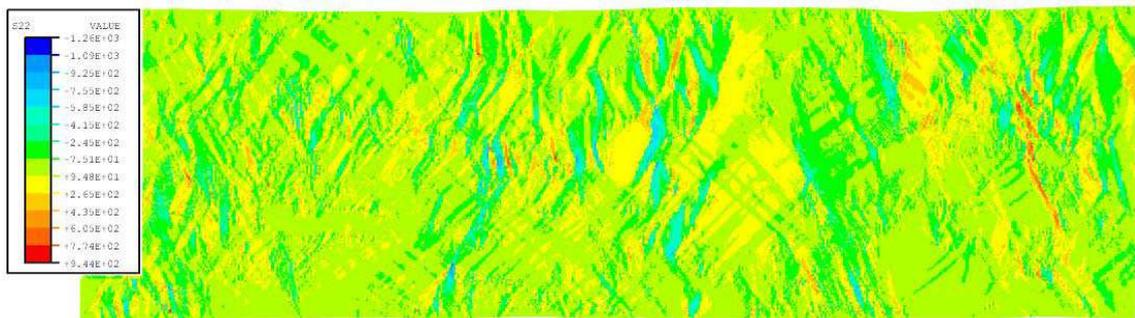


Figure AIII-8 : Cartographie S22.

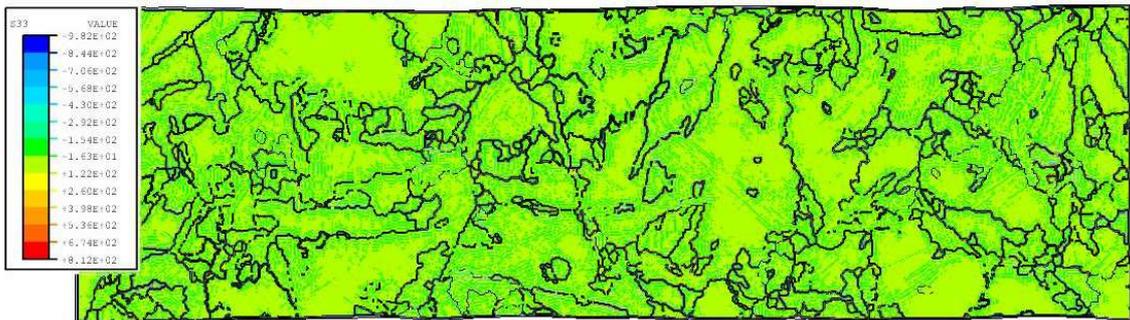
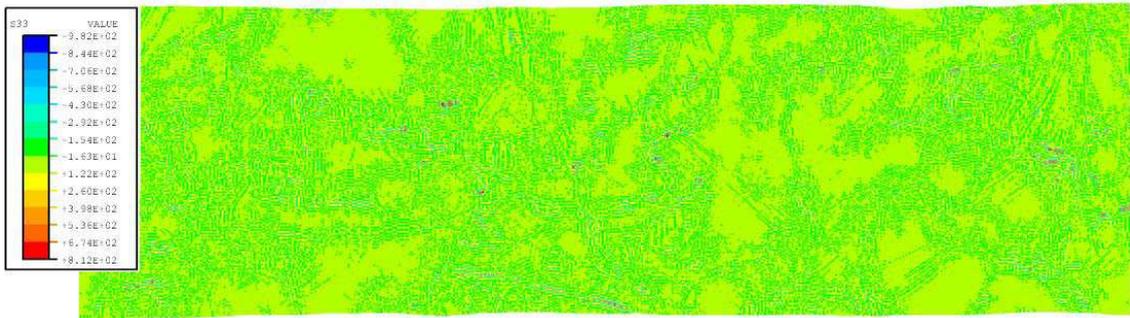


Figure AIII-9 : Cartographie S33.

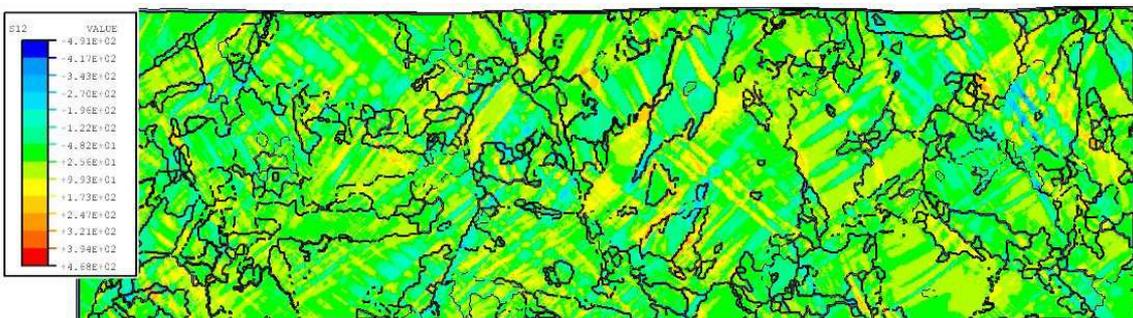
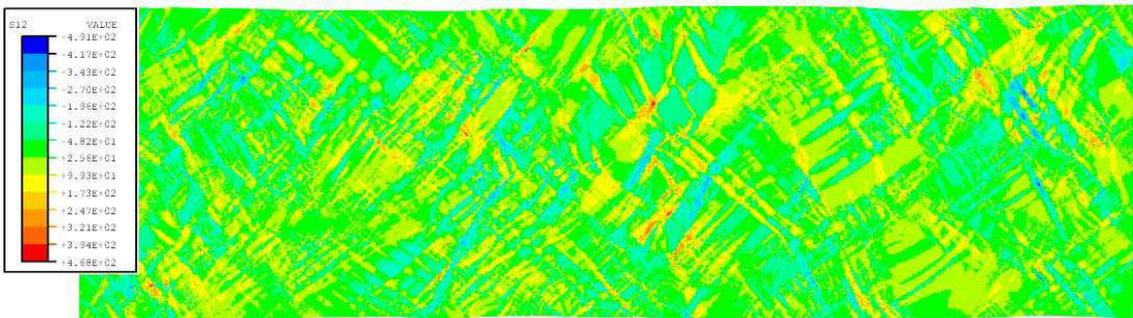


Figure AIII-10 : Cartographie S12.

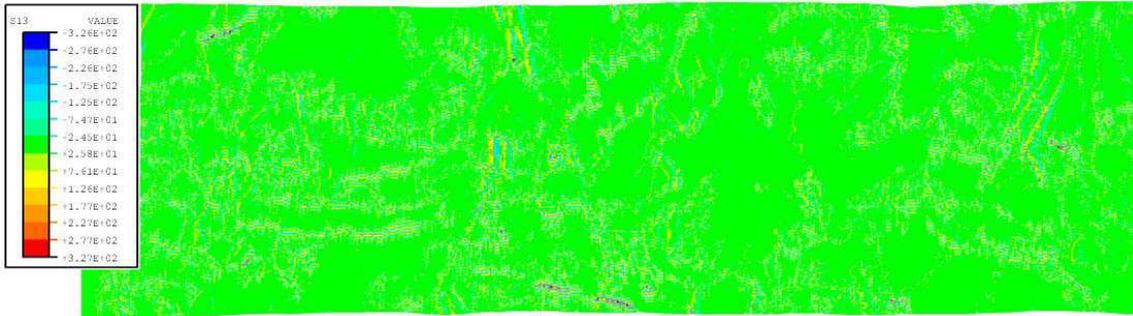


Figure AIII-11 : Cartographie S13.

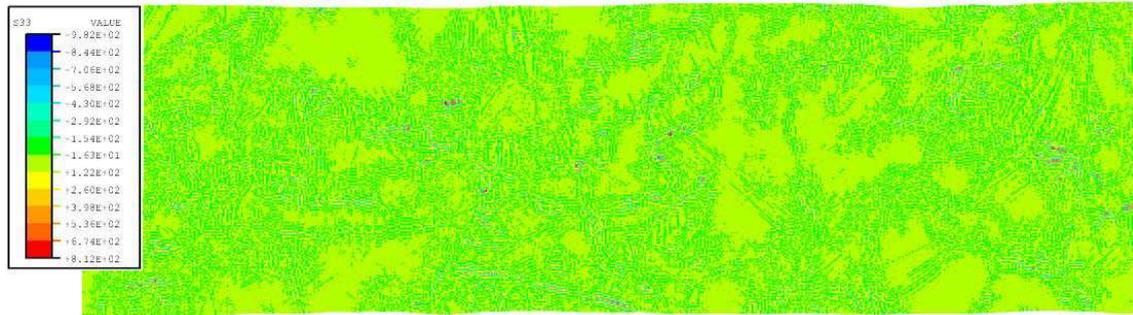
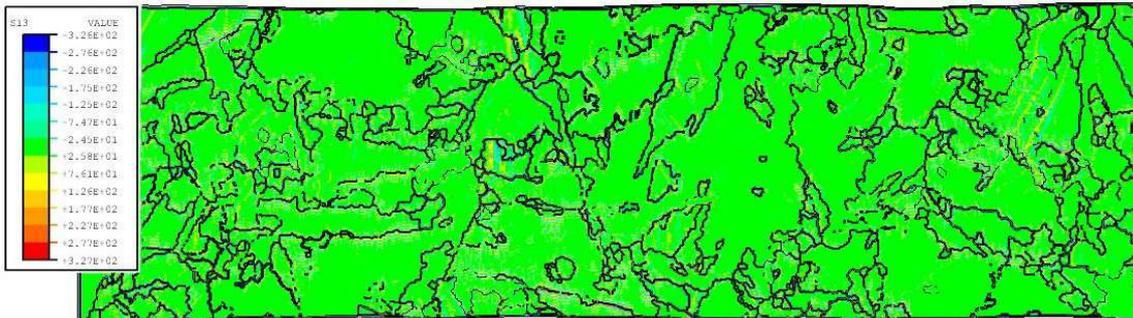
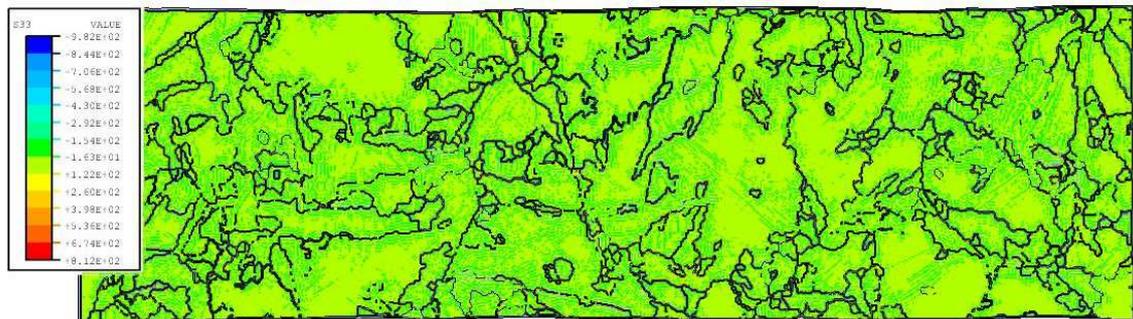


Figure AIII-12 : Cartographie S33.



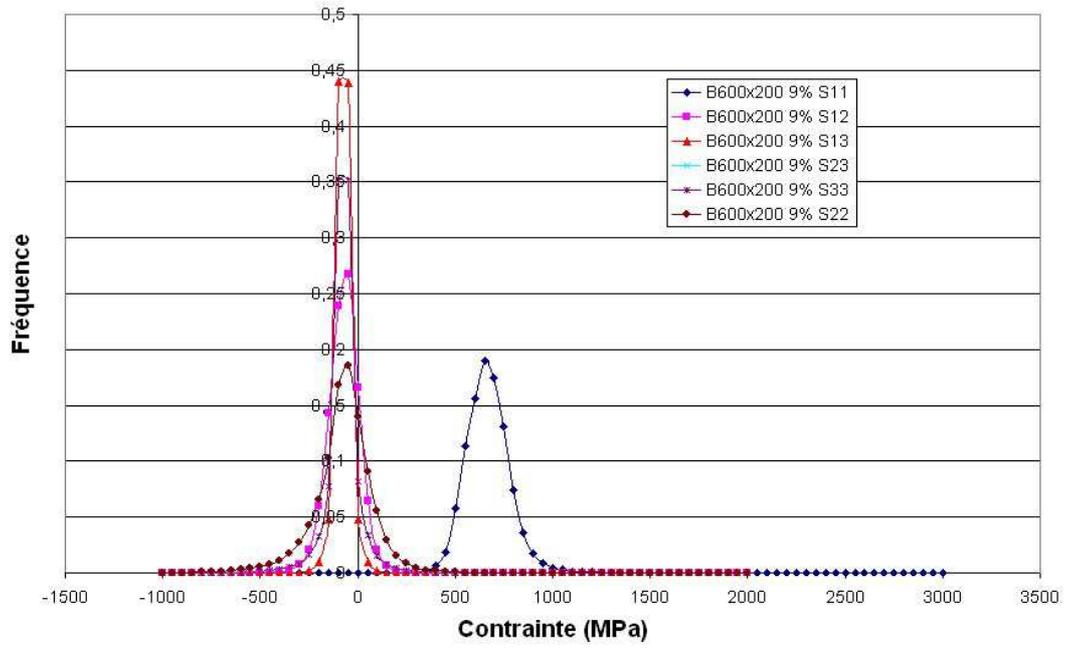


Figure AIII-13 : *Histogramme de distribution des composantes du tenseur des contraintes.*



## ANNEXE IV

### Martensite MI1+MHE pour $e=6\%$

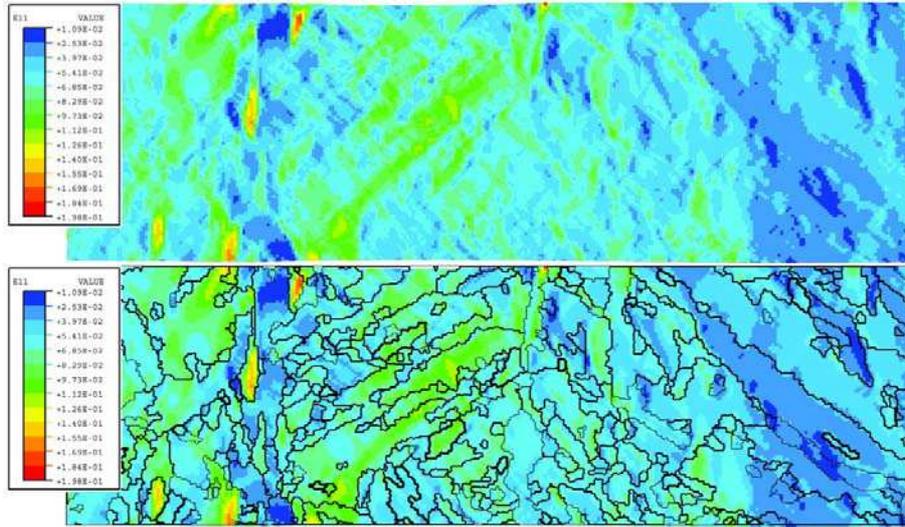


Figure AIV-1 : Martensite II+MHE, carte de la composante E11 pour  $e = 6\%$  (afin de mieux visualiser les déformations les cartes sont données avec et sans les joints de grains).

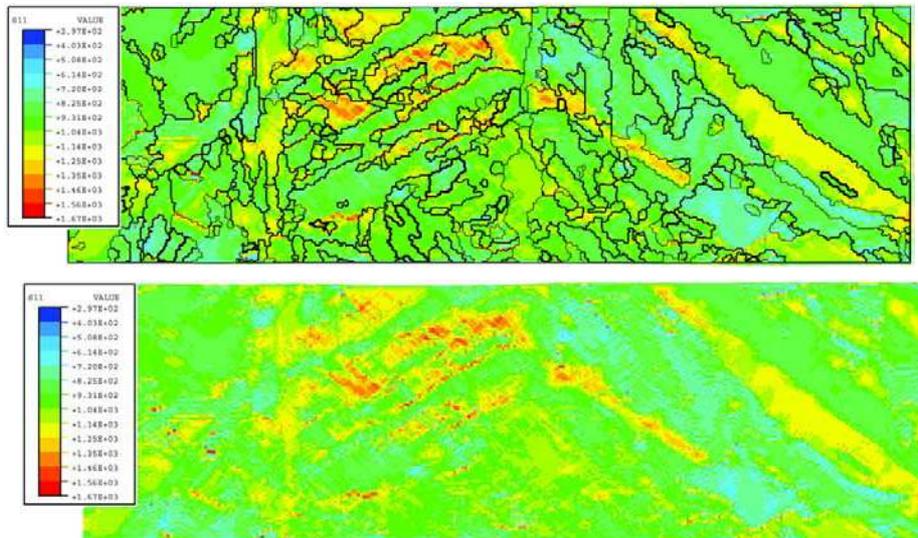


Figure AIV-2 : Martensite IIMHE, carte de la composante S11 pour  $e = 6\%$ .



# ANNEXE V -1

## CONTRAINTES INTERNES DANS DES BICRISTAUX

Effet de l'orientation des vecteurs de Burgers par rapport à l'interface  
Portée des contraintes internes  
Effet du MHE

### 1-Bicristaux de martensite ( $\epsilon=7,5\%$ )

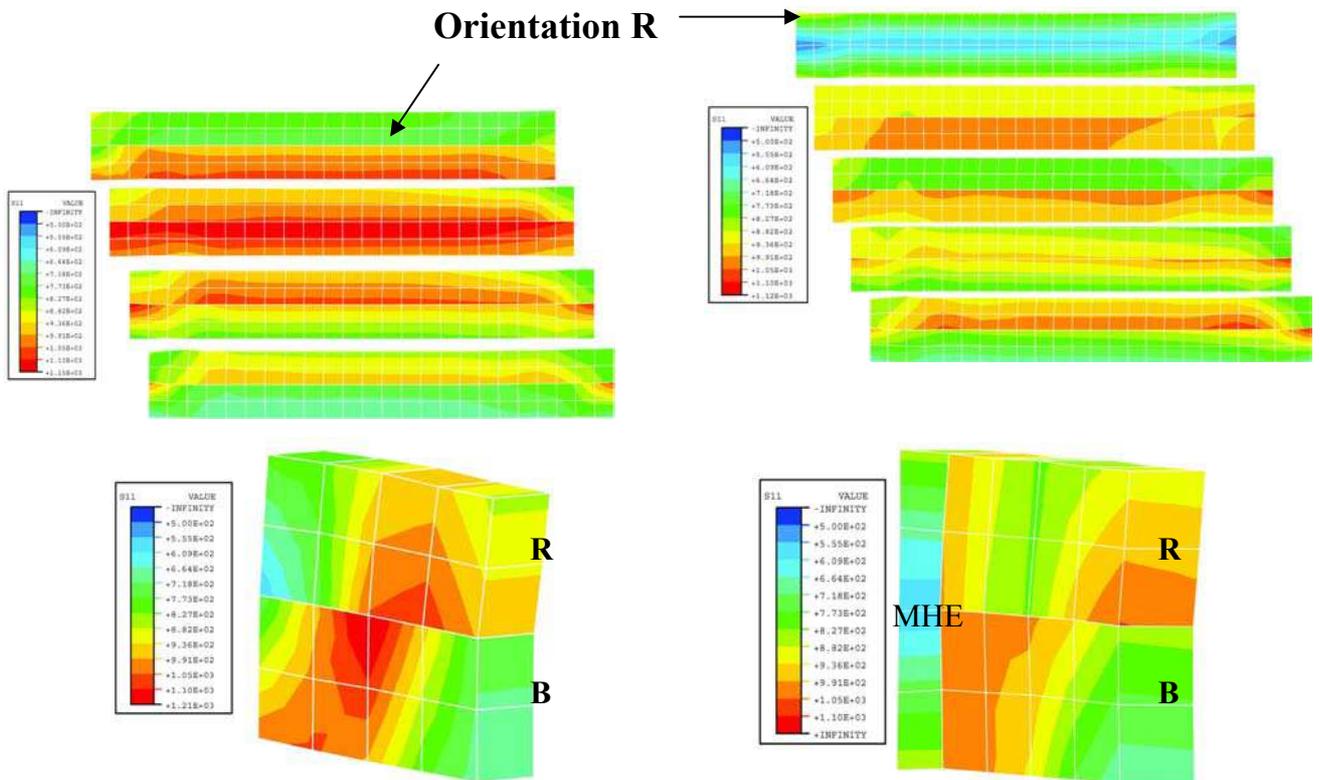


Figure AV-1 : Variations de  $S_{11}$  dans la section droite de bicristaux de martensite sans et avec MHE, grain haut : orientation R, grain bas orientation B.

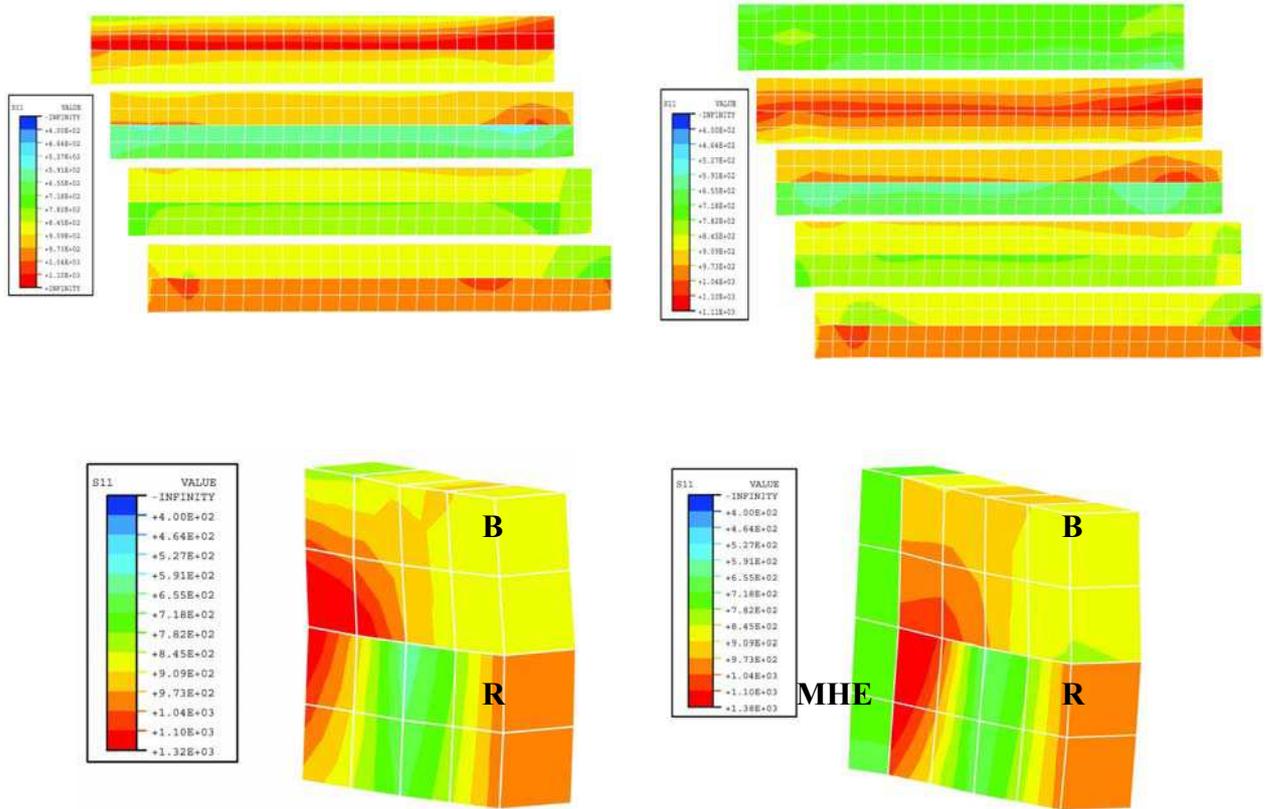


Figure AV-2 : Variations de  $S_{11}$  dans la section droite de bicristaux de martensite sans et avec MHE, grain Haut : orientation B, grain Bas : orientation R.

## 2- Bicristaux de bainite ( $\epsilon=7,5\%$ )

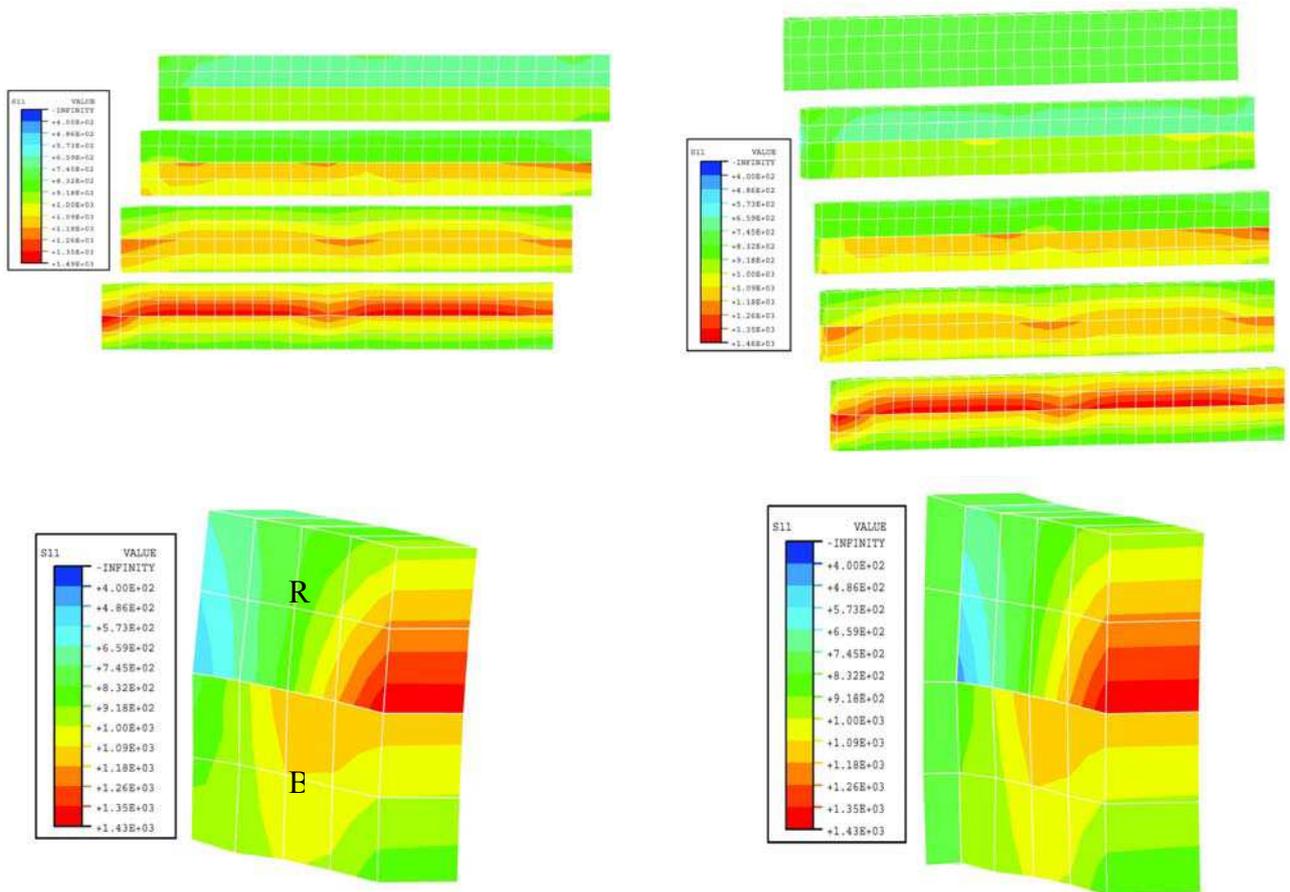


Figure AV-3 : Variations de  $S_{11}$  dans la section droite des bicristaux de bainite sans et avec MHE, grain haut : orientation R, grain bas : orientation B

## ANNEXE V-2

### 1 -Comparaison bainite et martensite avec et sans MHE (petits agrégats)

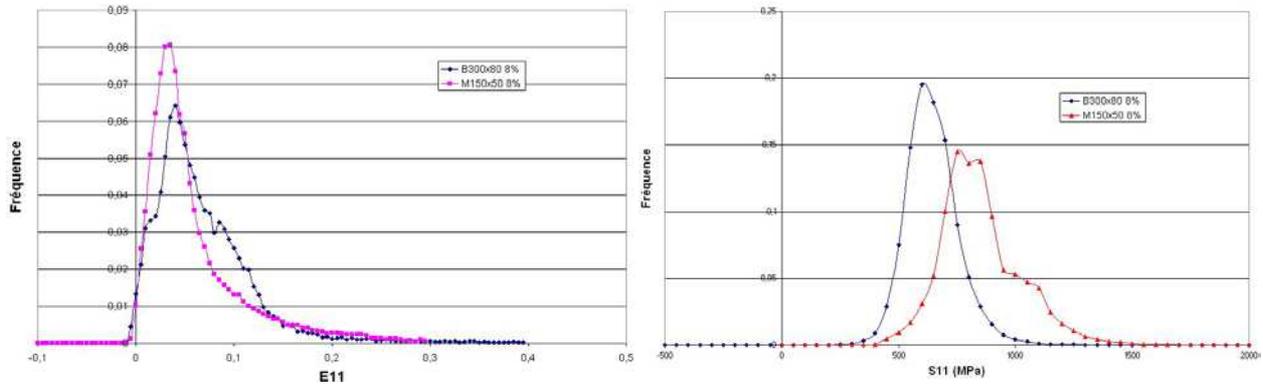


Figure AV-4 : Histogrammes petites bainite et martensite sans MHE

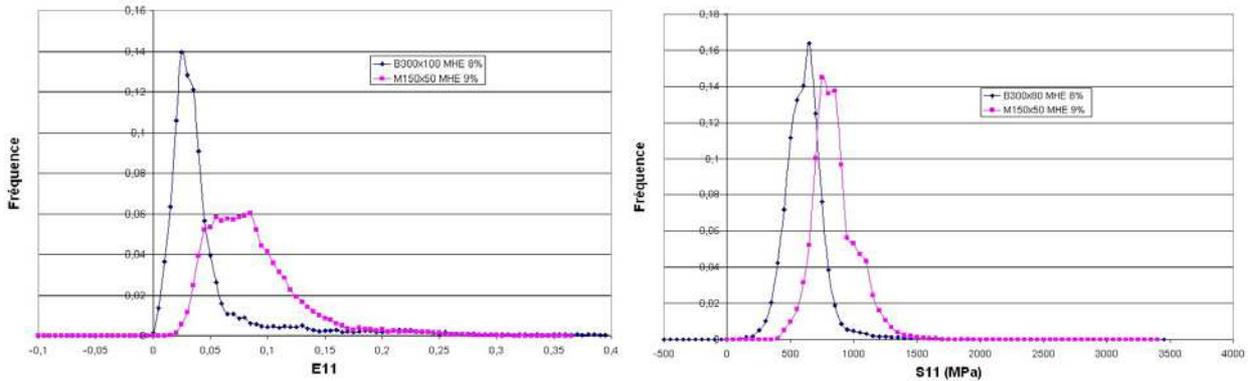


Figure AV-5 : Histogrammes petites bainite et martensite avec MHE.

### 2 Normalisation des histogrammes

Afin d'offrir une autre approche dans la comparaison des deux matériaux, nous avons normalisé les histogrammes en normant les valeurs de E11 par la valeur moyenne  $\langle E11 \rangle$  calculée.

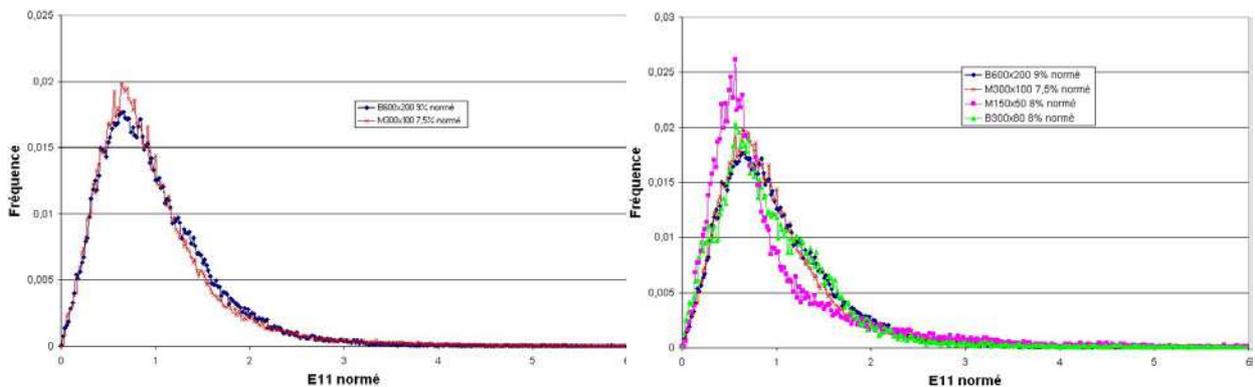


Figure AV-6 : Histogrammes E11 normé en l'absence de MHE.

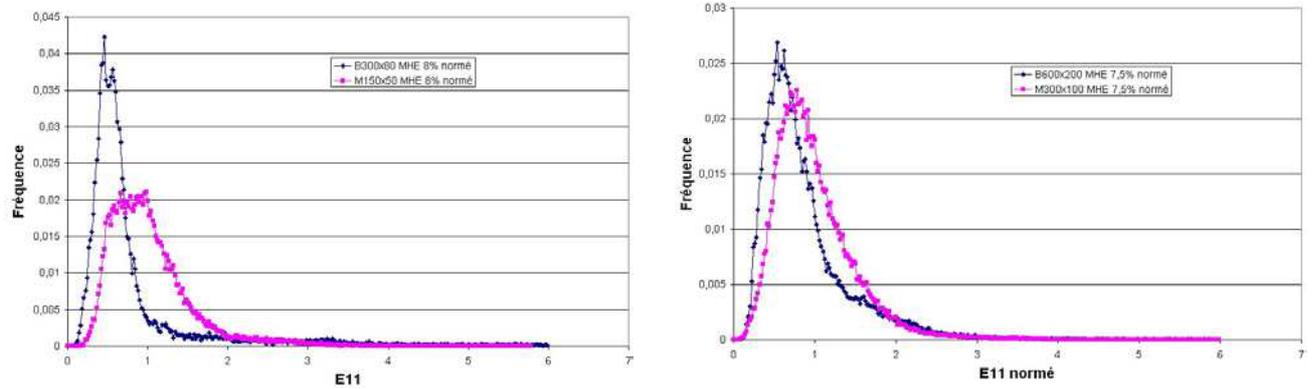


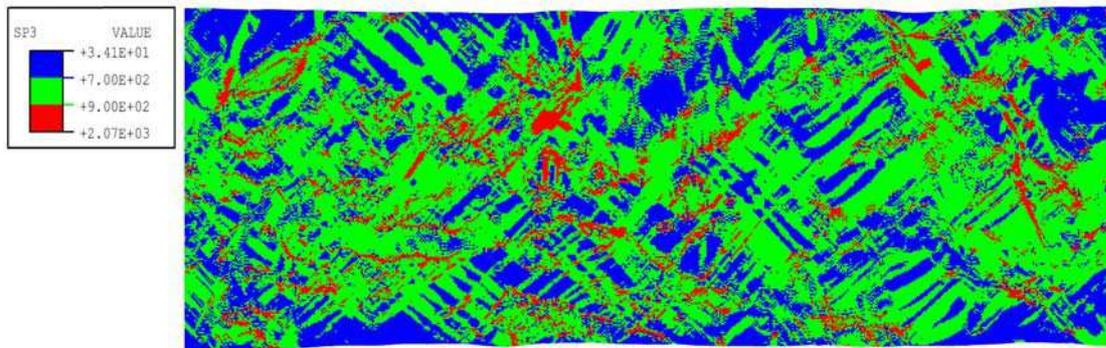
Figure AV-7 : Histogramme  $E_{11}$  normé avec MHE.

En l'absence de MHE, on constate un bon recouvrement des histogrammes quelque soit le taux d'élongation, on peut donc conclure que les hétérogénéités n'augmentent pas avec la déformation. En revanche, la présence d'un MHE accroît la différence entre bainite et martensite, surtout si le motif est petit donc représentatif d'une situation particulière.

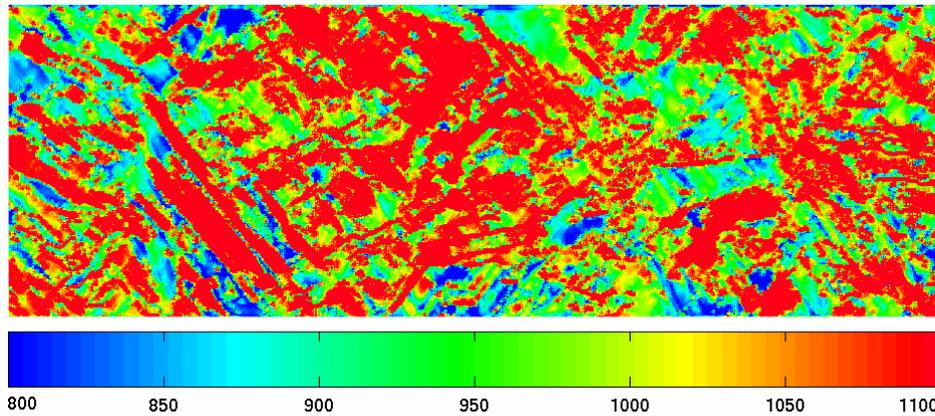
En ce qui concerne les contraintes, il est difficile de conclure. Normer les contraintes par la contrainte moyenne permet de juxtaposer les histogrammes. En revanche la courbe ci-dessous qui correspond à un pseudo module plastique local, accentue les différences entre les deux types de microstructures.

## ANNEXE V-3

Contraintes S11 dans la bainite sans MHE et dans la martensite avec MHE



Bainite revenue 600x300  $\mu\text{m}^2$



Martensite revenue 300x150  $\mu\text{m}^2$  : on distingue les 6 anciens grains austénitiques

## Annexe VI

### Comparaison petites bainite et martensite

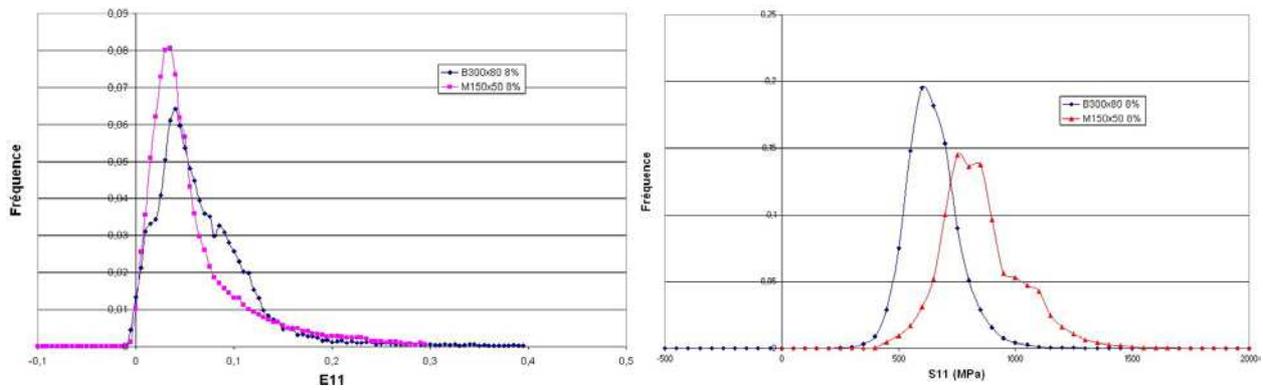


Figure AVI-1 : Histogrammes petites bainite et martensite sans MHE

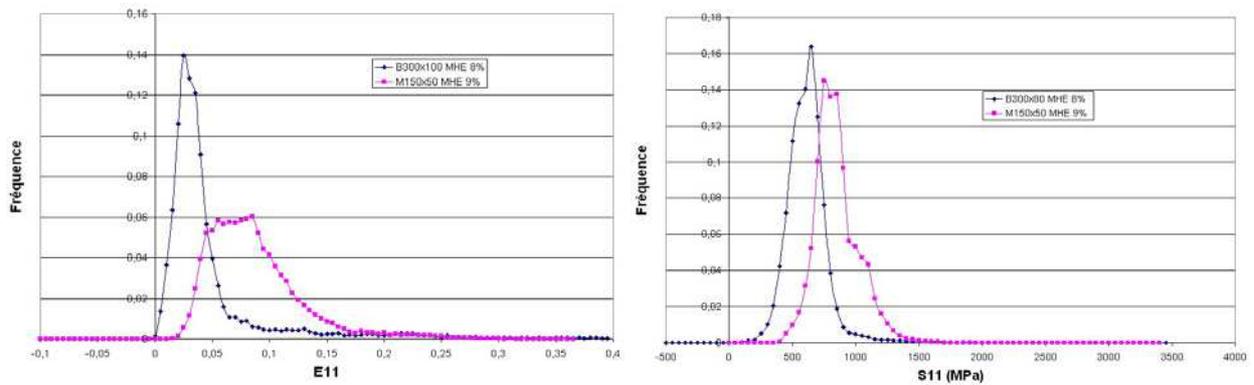


Figure AVI-2 : Histogrammes petites bainite et martensite avec MHE



## ANNEXE VII

### EFFET DE LA LARGEUR DES EPROUVETTES SUR LES CHAMPS DE DEFORMATION ET DE CONTRAINTE

L'étude présentée ci-dessous ne concerne que la bainite, elle a pour objectif de déterminer le rôle de la largeur de la structure sur la formation des hétérogénéités de déformation donc de des contraintes. Les résultats sont valables pour la martensite.

Considérons les mésobandes qui proviennent d'un effet de la structure (forme de l'éprouvette et sollicitation), on constate sur la figure AVII-1 que l'augmentation de la largeur modifie peu la position et l'amplitude des mésobandes. En revanche, les effets des bords libres suppriment certaines localisations intragranulaires ou en modifient la position.

A 5% de déformation, la localisation intragranulaire visible sur la figure AVII-2, donne naissance à une macrolocalisation précoce dans la petite éprouvette qui entraîne la décharge du reste de l'éprouvette. Dans la plus grande éprouvette, la localisation intragranulaire se propage plus lentement du fait des barrières plus nombreuses dans cet agrégat. est plus tardive dans l'autre. Dans les deux cas le bord libre joue un rôle important. Rappelons toute fois, que la localisation précoce observée ici provient des lois de comportement choisies qui sont proche de celle de la ferrite.

A faible déformation, les champs de contrainte (figure AVII-3) sont assez peu sensibles à la largeur de l'éprouvette. Pour des déformations plus élevées (figure AVII-4), nous constatons une différence mais celle-ci sont liées à l'existence des fortes macrolocalisations, qui, comme nous l'avons fait remarquer dans le chapitre sur la simulation, disparaisse pour un comportement plus adapté.

**Conclusion** : l'effet des bords libres est sensible sur les déformations est moins sensible sur les contraintes. Cela peut signifier que les contraintes internes sont à courtes distances, c'est à dire que leur portée est au maximum de l'ordre du grain de bainite. Si cette remarque, se vérifie dans la suite du travail, elle signifie que l'étude d'une couche de grain, bien que critiquable, donne des indications raisonnables sur les phénomènes importants.

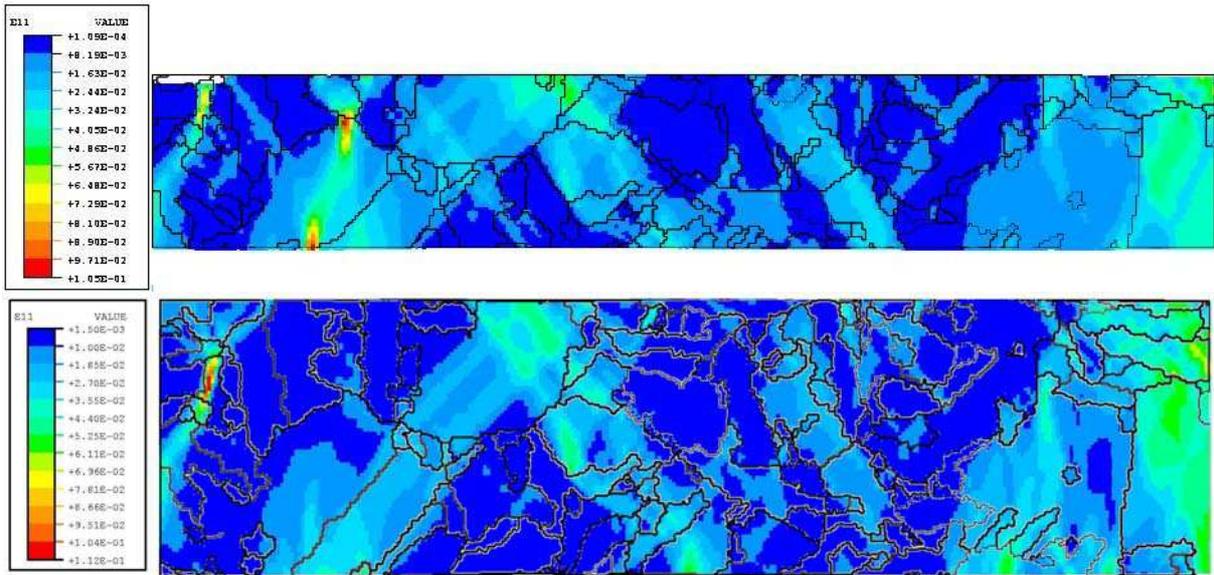


Figure AVII-1 : Bainite, carte de déformation  $E_{11}$ , pour une déformation macroscopique de 1.5%.

(a) dimension  $300\mu\text{m} \times 50\mu\text{m}$

(b) dimension  $300\mu\text{m} \times 80\mu\text{m}$

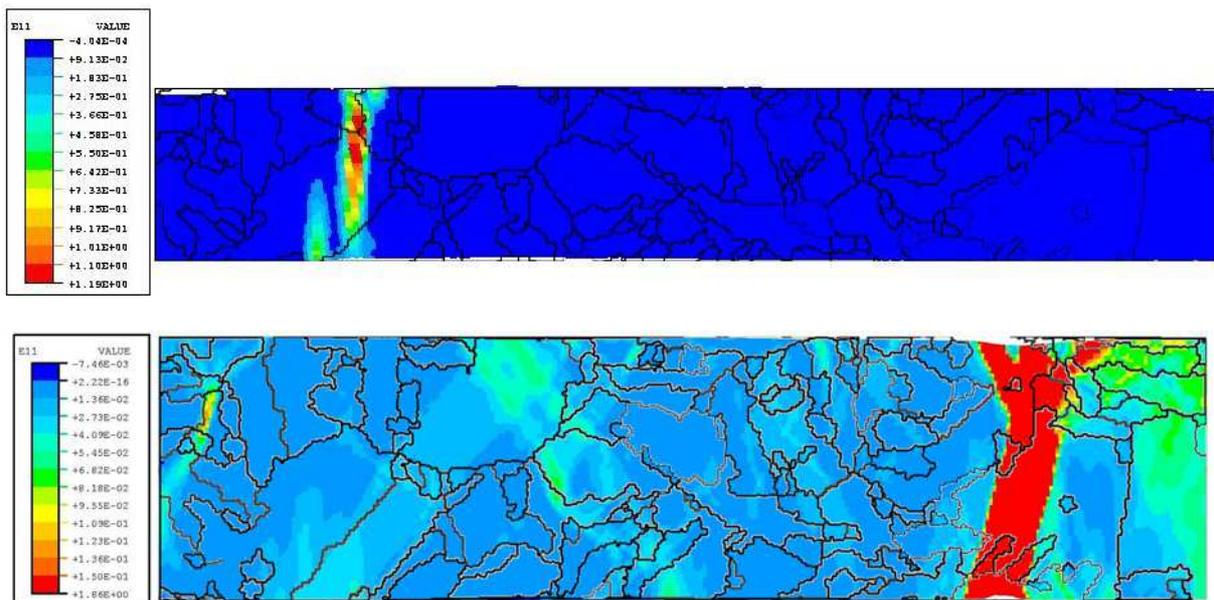


Figure AVII-2: Bainite, carte de déformation  $E_{11}$ , pour une déformation macroscopique de 5%.

(a) dimension  $300\mu\text{m} \times 50\mu\text{m}$

(b) dimension  $300\mu\text{m} \times 80\mu\text{m}$

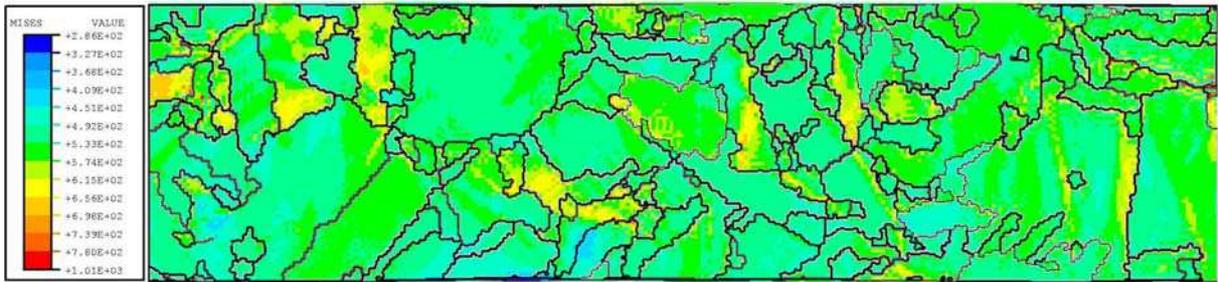
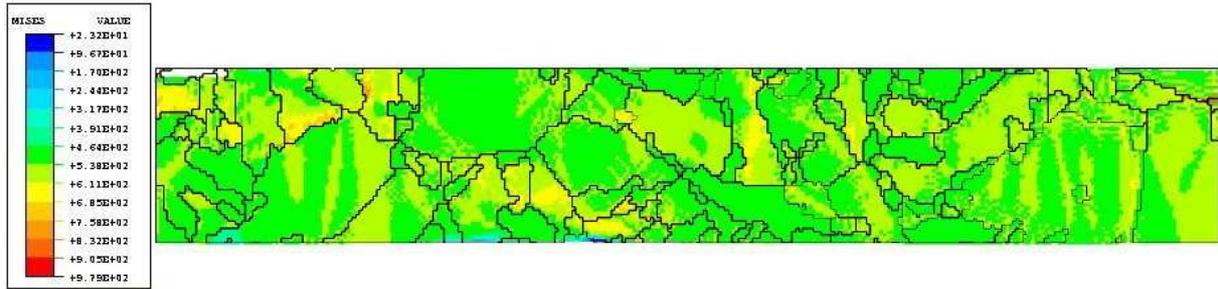


Figure AVII-3 : Bainite, carte de contrainte équivalente de von Mises, pour une déformation macroscopique de 1.5%.  
 (a) dimension 300µm x50µm  
 (b) dimension 300µm x80µm

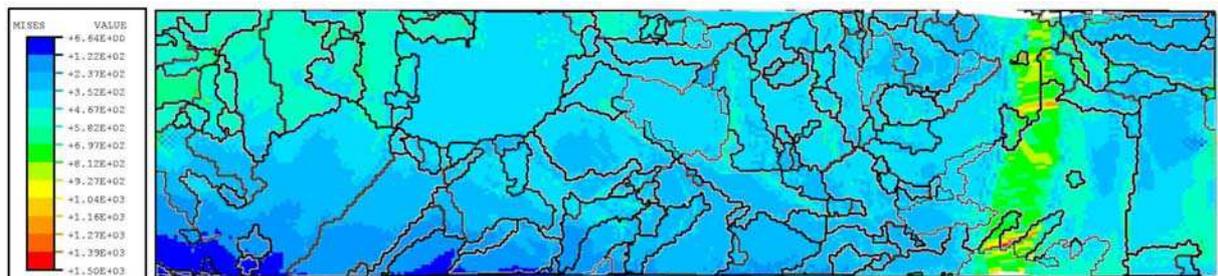
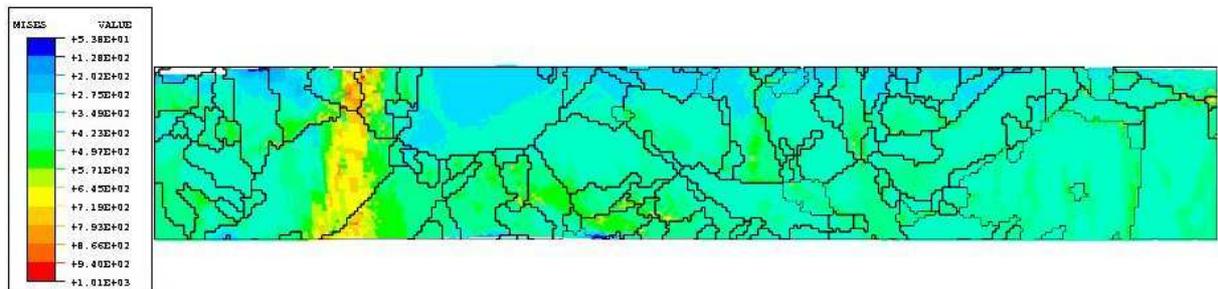


Figure AVII-4: Bainite, carte des contraintes équivalentes de von Mises, pour une déformation macroscopique de 5%.  
 (a) dimension 300µm x50µm  
 (b) dimension 300µm x80µm