

Effet de l'anisotropie élastique cristalline sur la distribution des facteurs de Schmid à la surface des polycristaux

Maxime Sauzay

DEN-DMN-SRMA, CEA, bâtiment 455, 91191 Gif-sur-Yvette cedex, France

Reçu le 4 janvier 2006 ; accepté après révision le 7 mars 2006

Présenté par Pierre Suquet

Résumé

Les études expérimentales des mécanismes de déformation plastique des polycristaux se réfèrent usuellement à la distribution des facteurs de Schmid, obtenue en supposant le comportement élastique cristallin isotrope. Cette Note présente une évaluation numérique de l'effet de l'anisotropie élastique cristalline des métaux à symétrie cubique sur la distribution des facteurs de Schmid apparents à la surface de polycristaux, à l'ordre II (moyennes sur tous les grains d'une orientation cristallographique donnée, i.e., dispersion inter-orientation) et à un ordre supérieur (variabilité entre les moyennes obtenues dans des grains de même orientation mais de voisins différents). La méthode des Eléments Finis est appliquée. Les métaux les plus étudiés dans la littérature sont pris en compte, dans l'ordre d'anisotropie croissante : aluminium, nickel, cuivre, austénite. Pour des métaux anisotropes à anisotropie prononcée, la distribution des facteurs de Schmid apparents à l'ordre II est notablement décalée vers les faibles valeurs du facteur de Schmid (facteur de Schmid maximal de 0,43 au lieu de 0,5) et l'ordre d'activation entre les orientations caractéristiques du triangle cristallographique standard est modifié. Concernant la dispersion intra-orientation, les écart-types sur les moyennes des contraintes dans des grains de même orientation mais de voisins différents s'avèrent un peu plus élevés que les écart-types inter-orientations ! Nos estimations numériques sont en accord quantitatif avec plusieurs observations et mesures de la littérature concernant la dispersion des contraintes et déformations dans des polycristaux de cuivre ou d'acier austénitique faiblement déformés. Les distributions des facteurs de Schmid apparents données dans cette Note (pour un degré d'anisotropie variable, avec ou sans effet des grains voisins) pourraient améliorer l'interprétation des observations des mécanismes de plasticité à la surface des polycristaux. **Pour citer cet article : M. Sauzay, C. R. Mecanique 334 (2006).**

© 2006 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Abstract

Influence of crystalline elasticity anisotropy on Schmid factor distribution at the free surface of polycrystals. Experimental studies of the plasticity mechanisms of polycrystals are usually based on the Schmid factor distribution supposing crystalline elasticity isotropy. A numerical evaluation of the effect of crystalline elasticity anisotropy on the apparent Schmid factor distribution at the free surface of polycrystals is presented. Cubic elasticity is considered. Order II stresses (averaged on all grains with the same crystallographic orientation) as well as variations between averages computed on grains with the same crystallographic orientation but with different neighbour grains are computed. The Finite Element Method is used. Commonly studied metals presenting an increasing anisotropy degree are considered (aluminium, nickel, austenite, copper). Concerning order II stresses in strongly anisotropic metals, the apparent Schmid factor distribution is drifted towards small Schmid factor values (the maximum Schmid factor is equal to 0.43 instead of 0.5) and the slip activation order between characteristic orientations of the crystallographic standard

Adresse e-mail : sauzay@cea.fr (M. Sauzay).

triangle is modified. The computed square deviations of the stresses averaged on grains with the same crystallographic orientation but with different neighbour grains are a bit higher than the second order ones (inter-orientation scatter). Our numerical evaluations agree quantitatively with several observations and measures of the literature concerning stress and strain distribution in copper and austenite polycrystals submitted to low amplitude loadings. Hopefully, the given apparent Schmid factor distributions could help to better understand the observations of the plasticity mechanisms taking place at the free surface of polycrystals. **To cite this article: M. Sauzay, C. R. Mecanique 334 (2006).**

© 2006 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Mots-clés : Rhéologie ; Endommagement ; Fatigue ; Rupture ; Elasticité cubique ; Anisotropie ; Polycristal ; Dispersion ; Facteur de Schmid

Keywords : Rheology ; Damage ; Fatigue ; Rupture ; Cubic elasticity ; Anisotropy ; Polycrystal ; Scatter ; Schmid factor

Abridged English version

Some extensively studied metals or alloys present a high crystalline elasticity anisotropy factor ($a = 3.3$ for copper and austenitic steels). This could affect the local stress fields in polycrystals. But the understanding of surface observations of plasticity mechanisms is generally based on the Schmid factor distribution computed supposing isotropic elasticity at the grain scale (this corresponds to the Reuss hypothesis of homogeneous stress through the polycrystal). Classical homogenization models can improve the isotropic predictions taking into account the interactions between a grain of a given crystallographic orientation and the macroscopic matrix. They permit then the evaluation of the second order stress distribution. However, these classical approaches neglect the interactions with the neighbour grains as well as free surface effects. Recently, several studies have been published concerning the inter-orientation and intra-orientation square deviations computed in polycrystals and induced by the crystalline viscoplasticity anisotropy of the Face Centred Cubic structure. However, fewer results are available concerning the effect of crystalline elasticity anisotropy. Our study concerns small remote stresses, which allows us to neglect crystalline plasticity anisotropy as a first approach. Numerical evaluations of the crystalline elasticity anisotropy effect on the local stress fields are presented (cubic symmetry). Numerous metals or alloys with varied anisotropy factor are considered (aluminium, ferrite, copper, austenite). The Finite Element Method is used. Small 3D surface aggregates are considered. Either a middle grain is embedded at the free surface of a matrix or this middle grain of a given orientation is surrounded by neighbour grains of random orientations (Monte Carlo approach). All the orientations have the same probability. The grains/aggregates are embedded in a large matrix.

Concerning the second order stresses (inter-orientation scatter), the apparent Schmid factor distribution is strongly modified for anisotropic metals such as austenite and copper with respect to the reference distribution based on isotropic elasticity. The apparent Schmid factor distribution is drifted towards small Schmid factor values (the maximum Schmid factor is equal to 0.43 instead of 0.5) and the slip activation order between characteristic orientations of the crystallographic standard triangle is modified. All these can be explained qualitatively comparing the local Young modulus (orientation scale) and the macroscopic one (polycrystal scale). For all studied metals, the computed square deviations of the tensile stresses averaged on individual grains with the same orientation but with different neighbour grains are higher than the second order ones. It means that the intra-orientation scatter is higher than the inter-orientation one (respectively $\pm 20\%$ and $\pm 11\%$). The apparent Schmid factor distributions have been computed for all the chosen metals and either neglecting or taking into account the influence of the orientations of the neighbour grains. The predictions based on these enhanced Schmid factor distributions agree quantitatively with several observations and measures of the literature concerning stress and strain distribution at the free surface of copper and austenite polycrystals (distribution of slip line feature and scatter in the dislocation microstructure between grains with the same orientation). Hopefully, the given apparent Schmid factor distributions could help to better understand the observations of the plasticity mechanisms taking place at the free surface of polycrystals.

1. Introduction

L'interprétation des observations des mécanismes de déformation à la surface des polycristaux se fonde généralement sur la distribution des facteurs de Schmid qui est obtenue en supposant la contrainte homogène dans le polycristal [1,2]. Cette approche néglige l'effet de l'anisotropie élastique cristalline pourtant élevée dans des métaux

couramment étudiés comme le cuivre et l'austénite, ce qui pourrait conduire à des interprétations biaisées. L'utilisation des modèles de localisation-homogénéisation permet de prendre en compte cette anisotropie élastique. Mais, jusque dans les années 90, ces modèles reposaient généralement sur une hypothèse de champs uniformes dans tous les grains de même orientation cristallographique (configuration « grain-matrice » sans effet de voisinage [3]). La dispersion intra-orientation (à l'intérieur de ces grains et entre ces grains de même orientation) n'était pas considérée (pour plus de détails, voir [4]). Dans un polycristal, les grains de même orientation sont en réalité entourés de voisins d'orientations cristallographiques différentes et variables d'un grain à l'autre. Ces effets de voisinage peuvent induire de la dispersion entre les grains possédant la même orientation. Considérant toutes les orientations possibles des grains voisins, les valeurs moyennes des contraintes dans tous les grains d'une orientation fixée ainsi que leurs dispersions dépendent à la fois de l'anisotropie élastique cristalline et de l'anisotropie (visco)plastique cristalline. Récemment, des études numériques détaillées ont été publiées concernant l'influence du comportement viscoplastique cristallin sur cette dispersion intra-orientation dans des agrégats « réguliers » (grains équiaxes identiques). Ces études se fondent sur des calculs numériques sur agrégats cristallins de grande taille [5,6] ou sur des approches de type homogénéisation avec évaluation de la dispersion intra-orientation [4,6,7]. Concernant l'influence des paramètres élastiques cristallins des réseaux cubiques, des études théoriques mettent en évidence l'effet du facteur d'anisotropie élastique sur la dispersion intra-orientation [8,9]. Parallèlement, de nombreuses observations et mesures expérimentales décrites dans la littérature sur métaux ou alliages à forte anisotropie élastique cristalline sollicités avec des chargements de faible amplitude indiquent qu'une forte dispersion des contraintes locales est à suspecter même parmi des grains d'orientations proches (cuivre [10,11], aciers austénitiques [2] et dans une moindre mesure nickel [1,12]). Mais à notre connaissance, les distributions des facteurs de Schmid « apparents », tenant compte de l'anisotropie élastique du cristal des métaux cités, avec ou sans effet des orientations aléatoires des grains voisins, ne sont pas donnés dans la littérature malgré tout l'intérêt pratique qu'elles pourraient présenter.

Cette Note est donc dédiée à l'évaluation des distributions de facteurs de Schmid « apparents » dans les polycristaux, avec ou sans effet des orientations des grains voisins, dans le domaine des faibles chargements. Différents métaux de facteurs d'anisotropie élastique variant entre 1,2 (aluminium, quasiment isotrope) à 3,3 (austénite, cuivre) ont été pris en compte. La méthode numérique employée repose sur des calculs par éléments finis et sur une approche statistique de type Monte Carlo (orientations aléatoires des grains voisins). Les effets de surface libre peuvent être pris en compte à la différence des modèles d'homogénéisation. Pour pouvoir être utilisées de manière pratique, les distributions prenant en compte les effets de voisinage sont calculées à partir des moyennes sur chacun des grains de même orientation plutôt que grâce à un écart-type global sur toute l'orientation qui est habituellement donné par les modèles d'homogénéisation [4,6,7]. La méthode des éléments finis s'avère donc ici la plus adaptée. Plusieurs prédictions de l'activation de la (micro)plasticité à la surface de polycristaux de cuivre, austénite et nickel sont comparées à observations et des mesures expérimentales de la littérature.

2. Élasticité cristalline et calculs par éléments finis

Le comportement macroscopique du polycristal est modélisé grâce à l'élasticité isotrope (absence de texture morphologique et cristalline). Pour les métaux/alliages à symétrie cubique, le comportement élastique cristallin est défini grâce à trois paramètres homogènes à une contrainte, C_{11} , C_{12} et C_{44} (notation de Voigt) [13]. L'anisotropie induite est en général estimée grâce à un coefficient d'anisotropie sans dimension défini par : $a = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12})$ [13]. Dans la suite, nous nous restreignons au cas des coefficients supérieurs à 1 (c'est le cas des métaux les plus étudiés [1,2,13]). Ce coefficient est égal au rapport des modules de cisaillement maximal et minimal en considérant tous les chargements de cisaillement possibles d'un monocristal [3] (Tableau 1). Ce coefficient est aussi proche du rapport des modules de traction en considérant tous les axes de traction possibles. Dans le cas d'un matériau isotrope, ce coefficient vaut 1. Dans ce cas, plus le coefficient est élevé, plus le cristal est anisotrope. Le Tableau 1 donne les valeurs des coefficients d'élasticité cristallins utilisés. L'aluminium, le nickel et l'austénite (ou le cuivre) sont respectivement faiblement, moyennement et fortement anisotropes. Les métaux considérés possèdent une structure Cubique à Face Centrée (CFC). Chaque grain possède 12 systèmes de glissement facile (plan de type $\{111\}$ et direction de glissement de type $\langle 110 \rangle$). La cission (maximale) est la contrainte de cisaillement maximale (en valeur absolue) obtenue parmi les douze calculées sur les systèmes de glissement. Les cinq orientations choisies pour évaluer la dispersion intra-orientation correspondent à des grains bien orientés de type A ou B (glissement simple, le plan et la direction de glissement sont inclinés de $\pm 45^\circ$ par rapport à l'axe de traction) et à des grains pour lesquels l'axe de traction

Tableau 1

Coefficients élastiques cristallins, rapports des modules de cisaillement extrêmes [13]. Rapport des modules de traction extrêmes

Table 1

Elastic constants of the studied crystals (GPa) and anisotropy coefficient [13]. Extremal Young modulus ratio

	C_{11}	C_{12}	C_{44}	$a = \mu_{\max}/\mu_{\min}$	E_{\max}/E_{\min}
Al	107	60,8	28,3	1,22	1,17
Ni	246,5	147,3	124,7	2,51	2,22
Cu	170	124	75	3,26	3,0
Fe γ	197,5	125	122	3,36	2,96

macroscopique est parallèle à un axe cristallographique $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ou $\langle 111 \rangle$ (glissement multiple). Les grains bien orientés ont un facteur de Schmid maximal, valant 0,5 (ce facteur de Schmid est calculé en supposant les grains isotropes élastiquement). Les systèmes A et B se distinguent du point de vue de leur orientation par rapport à la surface libre (le plan de glissement est respectivement perpendiculaire à la surface libre et orienté à 45° de celle-ci). Les orientations pour lesquelles l'axe de traction est parallèle à $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ ou $\langle 111 \rangle$ présentent un facteur de Schmid (comportement isotrope) valant respectivement 0,408, 0,408 et 0,272 (obtenu sur 8, 4 et 6 systèmes de glissement). Les orientations cristallines choisies se distinguent aussi par la grande variété de leurs modules élastiques projetés sur l'axe de traction : de la valeur maximale pour le grain de type $\langle 111 \rangle$ à la valeur minimale pour le grain $\langle 100 \rangle$. Les calculs ont été effectués grâce au logiciel de calcul par éléments finis CASTEM. Des procédures d'intégration de lois de comportement élastoviscoplastiques cristallines issues des travaux de thèse de Héraud [14] ont été implantées dans CASTEM. Elles sont ici utilisées dans le domaine élastique mais elles permettent le calcul des contraintes de cisaillement sur les systèmes de glissement de chaque grain. Des facteurs de Schmid « apparents », $f = \tau/\Sigma$ (avec τ la cission maximale calculée dans le grain et Σ la contrainte macroscopique de traction), peuvent ainsi être calculés (prenant en compte l'anisotropie élastique cristalline avec ou sans effet de voisinage) et comparés aux facteurs de Schmid de référence (comportement isotrope). Le maillage global est représenté Fig. 1(a). Il est constitué d'un petit agrégat (14 grains, Fig. 1(b)) noyé à la surface d'une matrice qui représente le polycristal (Fig. 1(a)) (concept de « microscope numérique » décrit dans [14]). La matrice représente un élément de volume macroscopique. Ses dimensions sont sept fois plus grandes que le diamètre de l'agrégat. Pour l'étude de la variabilité inter-orientation, seul le grain central a un comportement cristallin, les grains voisins se voient attribuer le même comportement (macroscopique) que la matrice. Pour l'étude de la variabilité des contraintes moyennés dans des grains de même orientation mais de voisins différents (dispersion intra-orientation), l'orientation du grain en surface, au centre de l'agrégat est fixée parmi les 5 orientations choisies (par exemple, grain bien orienté de type B). Les orientations de ses treize voisins directs sont

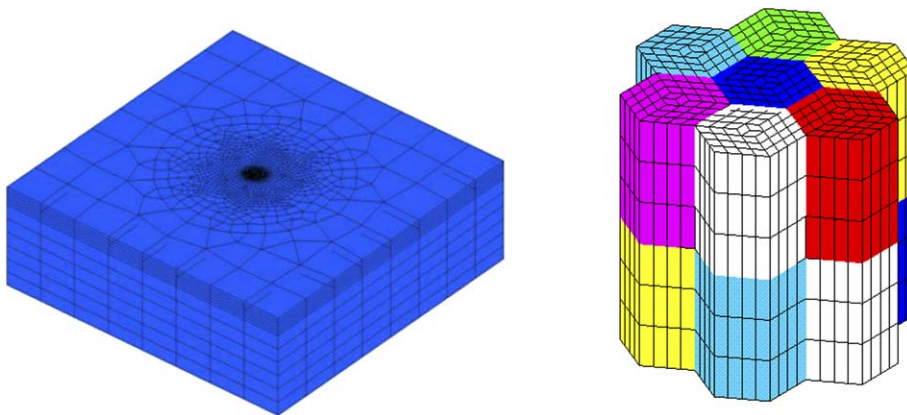


Fig. 1. (a) Maillage global (matrice et agrégat situé en son centre); (b) zoom sur le maillage de l'agrégat (le grain situé au centre et en surface a une orientation cristallographique fixée et les 13 grains voisins ont des orientations tirées au sort aléatoirement). L'agrégat se situe à la surface de la matrice.

Fig. 1. (a) Overall mesh of the matrix containing the surface aggregate; (b) mesh of the aggregate (the middle top grain has a given crystallographic orientation but the surrounding grains have random orientations).

aléatoires (Fig. 1(b)). Toutes les orientations sont supposées équiprobables (absence de texture). Suivant la méthode suivie par Pommier [9], dans chaque cas considéré (un métal et une orientation du grain central), 60 tirages au sort des orientations des voisins sont effectués, suivis de 60 calculs par éléments finis. Nous avons vérifié que ce nombre de réalisations permet d'obtenir une estimation fiable de la dispersion des champs induite par la microstructure locale dans les grains de même orientation. Le maillage a été construit de manière à réduire l'erreur de discrétisation (résolution d'un problème approché). Un calcul sur un maillage plus raffiné a permis d'estimer l'erreur numérique relative à environ 5 %. Le maillage est un maillage 3D qui permet de prendre en compte les effets de surface libre. Le maillage est sollicité en traction uniaxiale.

3. Résultats

Des calculs ont tout d'abord été effectués sur des configurations de type grain isolé/matrice, en négligeant l'effet des grains voisins (auxquels un comportement élastique isotrope, identique à celui de la matrice, est attribué). Soixante orientations cristallines ont été choisies aléatoirement. La dispersion entre les orientations a ainsi pu être évaluée. Pour l'austénite (ou le cuivre), l'écart-type inter-orientation sur la contrainte axiale (normalisée par la contrainte macroscopique appliquée Σ) est de 5,9% tandis que la dispersion s'élève à $\pm 11\%$. La moyenne de la contrainte axiale normalisée est proche de 1 mais légèrement inférieure (0,95). Cette différence peut être due à des effets de surface (les grains étudiés sont situés à la surface de la matrice) et/ou aux erreurs numériques. Grâce aux distributions des contraintes d'ordre II, il a été possible d'évaluer la distribution du facteur de Schmid apparent, $f = \tau/\Sigma$. Les fractions cumulées du facteur de Schmid apparent sont représentés sur la Fig. 2(a) pour différents métaux. Pour un métal purement isotrope ($a = 1$), le facteur de Schmid apparent peut atteindre la valeur maximale 0,5 et les fortes valeurs sont les plus représentées (le facteur de Schmid apparent est supérieur à 0,45 pour 65 % des orientations, en accord avec la courbe donnée par Blochwitz et al. [1]). La courbe calculée pour l'aluminium est proche de la précédente (facteur d'anisotropie proche de 1). L'effet de l'anisotropie élastique cristalline devient notable pour le nickel, le cuivre et l'austénite. La valeur du facteur de Schmid apparent maximal calculé n'est plus que de 0,446 pour le nickel, et environ 0,43 pour l'austénite et le cuivre, au lieu de 0,5 pour l'aluminium. Leur facteur de Schmid moyenné sur les 60 orientations choisies vaut respectivement 0,411 (nickel) et 0,388 (cuivre, austénite), au lieu de 0,452 pour Al. La Fig. 2(b) permet d'évaluer l'effet de l'anisotropie élastique du cuivre ou de l'austénite sur les facteurs de Schmid pour les orientations caractéristiques du triangle cristallographique standard. Une direction de traction $\langle 100 \rangle$ induisant un facteur de Schmid relativement élevé (0,408) dans un monocristal ou dans un polycristal isotrope induit un facteur de

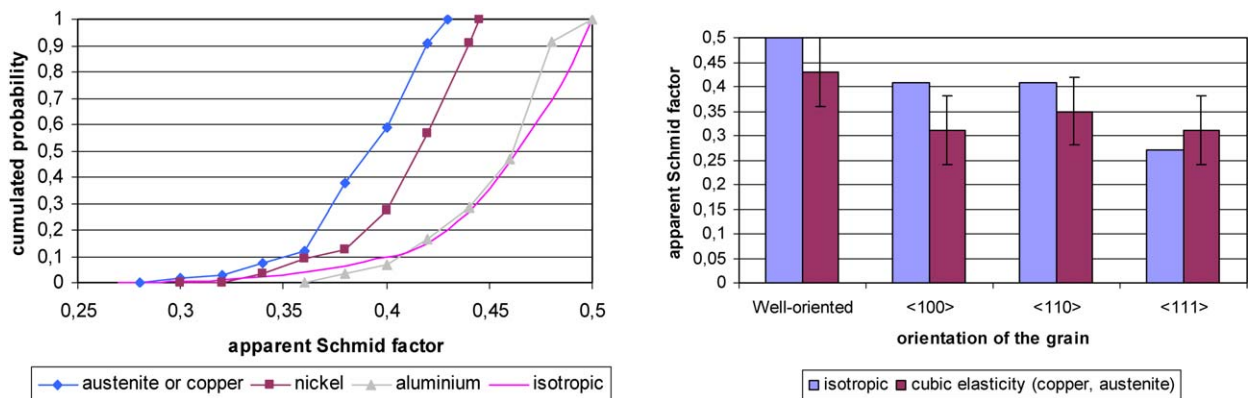


Fig. 2. (a) Probabilité cumulée du facteur de Schmid apparent en fonction du comportement élastique cristallin. Calculs par éléments finis (grain isolé situé à la surface d'une matrice de comportement élastique isotrope, 60 orientations cristallines choisies aléatoirement, sans prise en compte des effets de voisinage) pour l'austénite (ou le cuivre), le nickel et l'aluminium. Calcul direct pour le métal isotrope à l'échelle cristalline. (b) Facteurs de Schmid apparents obtenues pour différentes orientations en supposant le cristal isotrope ou anisotrope (austénite ou cuivre) avec une configuration grain-matrice. Si les orientations des grains voisins sont prises en compte, une dispersion intra-orientation est obtenue (barres d'erreur).

Fig. 2. (a) Cumulated probability of the apparent Schmid factor depending on the metal anisotropy. Second order stress (inclusion-matrix configuration, no neighbour grain effect); (b) Apparent Schmid factors computed either for an isotropic crystal or an anisotropic one (austenite or copper) using a grain-matrix configuration. If neighbour grain orientations are taken into account, an intra-orientation scatter is obtained which corresponds to the plotted error bars.

Schmid de seulement 0,31 si l'anisotropie est prise en compte. D'après la Fig. 2(b), l'anisotropie élastique cristalline peut modifier l'ordre d'activation du glissement entre les orientations caractéristiques. Ces effets d'anisotropie sont peut-être accentués par la présence de la surface libre (inexistants pour un métal élastique isotrope à l'échelle du grain). Grâce au calcul de la valeur du module d'Young selon l'axe de traction propre à chaque orientation [13], il est possible de comprendre comment l'anisotropie affecte le facteur de Schmid apparent. Pour l'austénite, le module d'Young macroscopique vaut 200 GPa. Le module selon la direction $\langle 111 \rangle$ s'élève à 290 GPa. L'anisotropie élastique induit donc une augmentation de la contrainte axiale locale dans les grains les plus mal orientés, ce qui donne une valeur du facteur de Schmid apparent de 0,31, supérieur au facteur de Schmid isotrope qui s'élève à seulement 0,272. Dans les grains bien orientés, le module d'Young selon la direction de traction s'élève à seulement 141 GPa pour un facteur de Schmid « isotrope » (maximal) de 0,5. Le module d'Young est encore plus faible dans les grains de direction $\langle 100 \rangle$: 100 GPa. Pour ces orientations, les contraintes calculées à l'échelle des grains sont inférieures à la contrainte macroscopique et les facteurs de Schmid effectifs inférieurs aux valeurs « isotropes » (soit respectivement 0,43 au lieu de 0,5 et 0,31 au lieu de 0,408).

Par rapport à la configuration « grain-matrice » précédemment utilisé, les calculs sur agrégat complet permettent d'estimer en plus l'influence des premiers grains voisins auxquels un comportement élastique anisotrope est attribué. Ces calculs plus complexes permettent dans un premier temps de valider l'approche « grain-matrice ». Pour chacune des cinq orientations sélectionnées pour évaluer l'influence des grains voisins, 60 six-uplets d'orientations des grains voisins ont été choisis aléatoirement et 60 calculs effectués permettant d'évaluer les contraintes moyennes dans chacun des 60 grains centraux de même orientation mais de voisins différents. Quelque soit le métal et l'orientation du grain central, les contraintes axiales moyennées sur l'ensemble des grains d'une même orientation sont très proches des valeurs calculées avec un modèle de type « grain-matrice » (différence relative de moins de 4%). Les effets de voisinage s'annulent donc quasiment, ce qui est en accord avec les modèles à champ moyen. La Fig. 3(a) permet d'observer la dispersion des cissions moyennes calculées dans des grains de même orientation (type B) mais de voisins différents pour des métaux fortement anisotropes comme l'austénite et le cuivre. La dispersion en terme de valeurs minimale/maximale s'élève à $\pm 20\%$. La dispersion due aux grains voisins est donc supérieure à celle due à l'orientation du grain lui-même ($\pm 11\%$) ! Les écart-types calculés à partir des contraintes moyennes obtenues dans chacun des 60 grains représentatifs d'une orientation donnée sont supérieurs à celle obtenue entre les orientations. L'écart-type des moyennes de la contrainte axiale normalisée varie d'ailleurs peu en fonction de l'orientation choisie pour le grain central (du moins parmi les 5 considérées), il est de l'ordre de 7,5% (moyenne sur les 5 orientations étudiées). Les distributions de facteur de Schmid apparentes ont aussi été caractérisées pour des anisotropies moyenne (nickel) et faible (aluminium). Les écart-types calculés sont représentés en fonction du facteur d'anisotropie a sur la Fig. 3(b). Pour les métaux à plus faible anisotropie, les écart-types intra-orientation demeurent supérieurs aux écart-types inter-

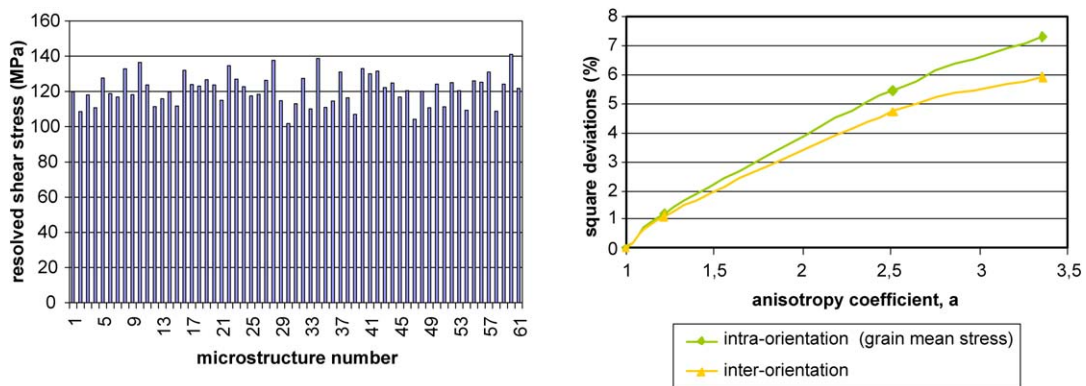


Fig. 3. (a) Dispersion de la cission maximale dans des grains bien orientés de type B (moyenne sur chaque grain). Acier austénitique. Chaque microstructure correspond à un jeu d'orientations aléatoires des grains voisins. La contrainte macroscopique de traction s'élève à 300 MPa. (b) Écart-types inter-orientation et intra-orientation de la contrainte axiale (normalisée par la contrainte macroscopique). Dépendance vis-à-vis du coefficient d'anisotropie a .

Fig. 3. (a) Scatter of the resolved shear stress in well-oriented type B grains (average on each of them). Austenite. Each microstructure corresponds to one particular set of random orientations of the neighbour grains. The macroscopic tensile stress is equal to 300 MPa. (b) Inter-orientation and intra-orientation square deviation of the normalized tensile stress. Dependence with respect to the anisotropy coefficient, a .

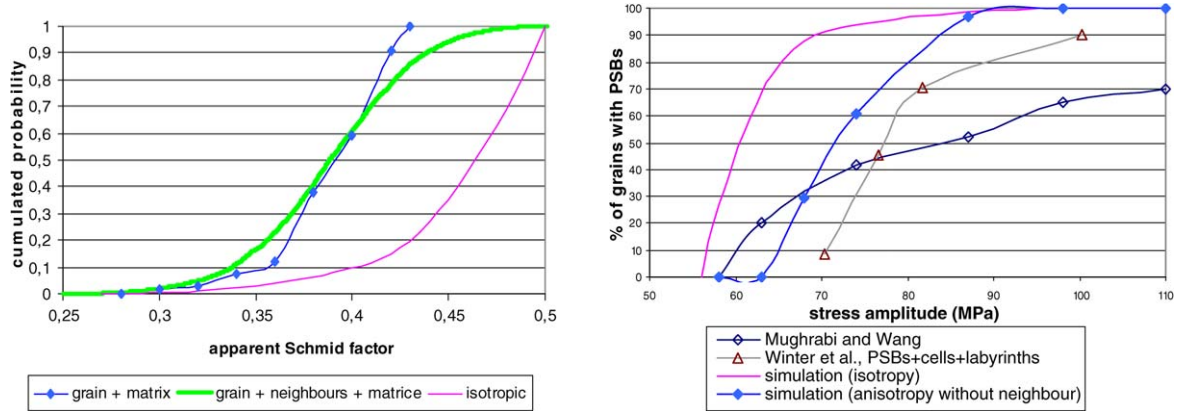


Fig. 4. (a) Probabilités cumulées du facteur de Schmid apparent pour un cristal isotrope ou anisotrope (cas de l'austénite et du cuivre : $a \approx 3,3$) avec ou sans effet des orientations des grains voisins. (b) Fractions de grains situés à la surface de polycristaux de cuivre et présentant une microstructure de dislocations. Comparaison entre les mesures expérimentales de Mughrabi et Wang [10] ou Winter et al. [11] et les prédictions des modèles isotrope et anisotrope (sans effet de voisinage). Utilisation des courbes de la Fig. 2(a) et du seuil $\tau_{PSB} \approx 28$ MPa [10,11].

Fig. 4. (a) Cumulated probabilities of the apparent Schmid factor for an isotropic crystal or an anisotropic one (austenite, copper: $a \approx 3.3$) either neglecting the orientations of the neighbour grains or taking them into account; (b) fraction of surface grains presenting dislocation microstructures (copper polycrystals). Comparison between the experimental measures of Mughrabi and Wang [10] or Winter et al. [11] and the predictions of the isotropic and anisotropic models (without neighbour grain effect). The curves of Fig. 2(a) and a value of τ_{PSB} equal to 28 MPa [10,11] are used.

orientations ! Enfin, nous avons comparé les résultats de Pommier aux nôtres, obtenues tous deux grâce à un calcul de type 2D (plaque mince, cuivre, grain $\langle 100 \rangle$). Un écart-type sur de la contrainte axiale calculée en surface des grains $\langle 100 \rangle$ de 7,1% est obtenu par Pommier [9] qui utilise plusieurs couronnes de grains voisins au lieu d'une seule dans notre approche qui donne un écart-type de 6,4%. Dans le cadre de l'anisotropie élastique et d'agrégats « réguliers », une seule couronne de grains permet une estimation très raisonnable des écart-types pour un coût numérique moindre. La courbe de probabilité cumulée du facteur de Schmid apparent tenant compte de l'anisotropie élastique cristalline du cuivre ou de l'austénite est représentée sur la Fig. 4(a). Elle a été calculée en sommant la distribution inter-orientation (Fig. 2(a)) et la distribution intra-orientation (moyenne sur les cinq orientations étudiées) (Fig. 2(b)). La valeur classique de 0,5 peut être atteinte à cause des effets de voisinage conduisant à une concentration de contrainte locale. Mais les fortes orientations (0,45–0,5) demeurent nettement moins probables qu'avec la distribution isotrope (probabilités respectives de 8 et 65%).

4. Discussion

Les résultats précédents permettent d'expliquer certaines observations de la littérature concernant les mécanismes de (micro)plasticité dans les polycristaux. Mughrabi et Wang ont étudié en détails l'apparition des Bandes de Glissement Persistantes (BGP) à la surface de polycristaux de cuivre sollicités dans le domaine des faibles déformations cycliques [10]. Ils ont notamment mesuré le pourcentage de grains en surface présentant des BGP, à différents niveaux de déformation appliquée. Des mesures similaires ont été effectuées par Winter et ses collaborateurs [11]. Connaissant la cission critique d'apparition des BGP dans un monocristal, $\tau_{PSB} \approx 28$ MPa, ainsi que la distribution des facteurs de Schmid apparent, $f = \tau / \Sigma$ (Fig. 2(a)), il est possible d'évaluer le pourcentage de grains pour lesquels le critère est vérifié, i.e., tels que $\tau = f \Sigma \geq \tau_{PSB}$. Les prédictions obtenues avec un modèle de distribution du facteur de Schmid fondé sur l'isotropie ou sur l'anisotropie (sans effet des grains voisins) peuvent être comparées aux mesures de Mughrabi et Wang ou de Winter et al. grâce à la Fig. 4(b). La distribution de référence (comportement isotrope) surestime très largement le nombre de grains avec BGP et de fait surestime probablement les valeurs réelles des rapports entre cissions et contrainte macroscopique. La distribution se basant sur l'anisotropie prédit beaucoup plus raisonnablement la déformation plastique progressive du polycristal sans l'utilisation d'aucun paramètre ajustable. La distribution des facteurs de Schmid apparents tenant compte de l'anisotropie élastique du cuivre et des orientations des grains voisins donne des résultats très proches, sauf au voisinage de $2\tau_{PSB}$ où les deux distributions diffèrent (Figs. 4(b) et 3(b)).

De nombreux auteurs ont aussi mis en évidence une dispersion des microstructures de dislocations entre grains d'orientation équivalente [1,2,10–12]. Ainsi, dans les conditions précédentes, Mughrabi et Wang observent des Bandes de Glissement Persistantes dans un grain bien orienté mais en notent l'absence dans un autre de même orientation par rapport à l'axe de traction [10]. En tenant compte de la variabilité intra-orientation induite par les grains voisins, le calcul des cissions minimale et maximale obtenue pour cette orientation, pour le cuivre et à le même niveau de chargement donne des valeurs d'environ 28 et 39 MPa (utilisation d'une figure similaire à la Fig. 2(b) obtenue pour le cuivre). La cission minimale est donc égale à la cission critique d'apparition des BGP, ce qui pourrait expliquer la dispersion des microstructures de dislocations constatée par Mughrabi et Wang. Des observations similaires sont reportées par Winter et al. (cuivre) [11], Man et al. (acier austénitique) [2] et Blochwitz et al. (nickel) [1] et peuvent aussi être expliquées grâce à nos estimations. Enfin, concernant le nickel qui est moins anisotrope que le cuivre ou l'austénite, Buque note que la dispersion intra-orientation des microstructures de dislocations semble plus limitée que pour le cuivre [12] ce qui est en accord qualitatif avec nos résultats numériques concernant la dispersion des contraintes (Fig. 3(b)).

Enfin, des comparaisons ont été effectuées des moyennes et des écart-types par orientation prédits par le modèle analytique de Kreher et Pompe [8] basé sur le problème de l'inclusion en volume. Les écarts entre les deux modèles sont inférieurs à 10% pour les moyennes et à 18% pour les écart-types et demeurent donc limités. Il est à noter que d'une part les méthodes de calculs sont différentes et que d'autre part de faibles écarts sur les contraintes locales peuvent induire des variations notables du comportement microplastique (déclenchement ou non du glissement plastique). Des calculs numériques similaires à ceux décrits dans cette Note mais sur agrégats en volume sont nécessaires de manière à conclure de manière plus définitive à propos des effets de surface libre.

5. Conclusions

Dans des métaux couramment étudiés comme le cuivre et l'austénite, l'anisotropie élastique cristalline affecte notablement les distributions des facteurs de Schmid (apparents) et des contraintes à la surface des polycristaux par rapport à la distribution de référence (isotropie élastique, contrainte homogène). Si les effets de voisinage sont négligés (modèle grain-matrice), les distributions des facteurs de Schmid apparents sont décalés vers les faibles valeurs, le facteur de Schmid apparent maximal s'élève à seulement 0,43 (au lieu de 0,5) et l'ordre d'activation du glissement dans les orientations caractéristiques du triangle cristallographique standard est modifié. Si les effets de voisinage sont pris en compte, la dispersion intra-orientation s'avère supérieure à la dispersion inter-orientation (modèle grain-matrice), ce qui signifie que les orientations des grains voisins induisent plus de dispersion que l'orientation du grain elle-même ! L'effet du degré d'anisotropie a aussi été étudié (aluminium, nickel). L'utilisation des distributions de facteurs de Schmid apparents tenant compte de l'anisotropie élastique améliorent les prédictions de l'activation du glissement à la surface de polycristaux qui sont en meilleur accord avec les résultats expérimentaux que celles obtenues avec la distribution de référence isotrope.

Ces premiers résultats sont à étendre dans le domaine élasto(visco)plastique cristallin de manière à évaluer l'influence conjointe des deux types d'anisotropie cristalline, élastique et (visco)plastique. De même, les effets de variabilité morphologique [5] ou de texture peuvent aussi être explorés. Les distributions des facteurs de Schmid apparents proposées dans cette Note peuvent déjà contribuer à rendre plus quantitatives les interprétations des mécanismes de déformation dans les polycristaux les plus couramment étudiés dans la littérature.

Remerciements

Les auteurs remercient l'IRSN et le CEA (DEN-DSNI et DEN-DSOE) pour leur soutien et le Professeur Haël Mughrabi pour son intérêt pour cette étude.

Références

- [1] C. Blochwitz, J. Brechbühl, W. Tirschler, Analysis of activated slip systems in fatigued nickel polycrystals using the EBSD-technique in the scanning electron microscope, *Mater. Sci. Engrg. A* 210 (1996) 42–47.
- [2] J. Man, K. Obrtlík, C. Blochwitz, J. Polak, Atomic force microscopy of surface relief in individual grains of fatigued 316L austenitic stainless steel, *Acta Materialia* 50 (2002) 3767–3780.

- [3] J.D. Eshelby, The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems, *Proc. R. Soc. London A* 241 (1957) 376–396.
- [4] Y. Liu, P. Ponte Castaneda, Homogenization estimates for the average behavior and field fluctuations in cubic and hexagonal viscoplastic polycrystals, *J. Mech. Phys. Sol.* 52 (2004) 1175–1211.
- [5] G. Cailletaud, S. Forest, D. Jeulin, F. Feyel, I. Galliet, V. Mounoury, S. Quilici, Some elements of microstructural mechanics, *Comput. Mater. Sci.* 27 (2003) 351–374.
- [6] R.A. Lebensohn, Y. Liu, P. Ponte Castaneda, On the accuracy of the self-consistent approximation for polycrystals: comparison with full-field numerical simulations, *Acta Materialia* 52 (2004) 5347–5361.
- [7] R. Brenner, O. Castelneau, L. Badaea, Mechanical fluctuations in polycrystals estimated by homogenization techniques, *Proc. R. Soc. London A* 460 (2004) 3589–3612.
- [8] W. Kreher, W. Pompe, Field fluctuations in an heterogeneous elastic material—an information theory approach, *J. Mech. Phys. Sol.* 33 (1985) 419–445.
- [9] S. Pommier, ‘Arching’ effect in elastic polycrystals: implications for the variability of fatigue lives, *Fatigue Engng. Mater. Structures* 25 (2002) 331–348.
- [10] H. Mughrabi, R. Wang, Cyclic stress-strain response and high-cycle fatigue behaviour of copper polycrystals, in: P. Lukas, J. Polak (Eds.), *Basic Mechanisms in Fatigue of Metals*, Elsevier, Amsterdam, 1988.
- [11] A.T. Winter, O.B. Pedersen, K.V. Rasmussen, Dislocation microstructures in fatigued copper polycrystals, *Acta Metallurgica* 29 (1981) 735–748.
- [12] C. Buque, J. Bretschneider, A. Schwab, C. Holste, Dislocation structures in cyclically deformed nickel polycrystals, *Mater. Sci. Engng. A* 300 (2001) 254–262.
- [13] H.B. Huntington, The elastic constants of crystals, in: F. Seitz, D. Turnbull (Eds.), *Solid State Physics*, vol. 7, Academic Press Incorporation Publishers, New York, 1958, pp. 214–351.
- [14] H. Haddadi, S. Héraud, L. Allais, C. Téodosiu, A. Zaoui, A “numerical mesoscope” for the investigation of local fields in rate-dependent elastoplastic materials at finite strain, in: C. Miehe (Ed.), *IUTAM Symposium on “Computational Mechanics of Solid Materials at Large Strains”*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht/Norwell, MA, 2001.