Effet d'une déformation plastique uniaxiale sur les contraintes mésoscopiques dans les métaux hexagonaux

David Gloaguen, Marc François, Ronald Guillen, Jean Royer

► To cite this version:

David Gloaguen, Marc François, Ronald Guillen, Jean Royer. Effet d'une déformation plastique uniaxiale sur les contraintes mésoscopiques dans les métaux hexagonaux. *Revue de Métallurgie*, 2003, 12, pp.1157-1161. 10.1051/metal:2003184 . hal-01007025

HAL Id: hal-01007025

<https://hal.science/hal-01007025>

Submitted on 27 Apr 2021

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.

Distributed under a Creative Commons Attribution| 4.0 International License

Effet d'une déformation plastique uniaxiale sur les contraintes mésoscopiques dans les métaux hexagonaux

D. Gloaguen*, M. François**, R. Guillen*, J. Royer***

* Laboratoire d'Applications des Matériaux à la Mécanique - LAMM, C.R.T.T., I.U.T. Saint-Nazaire

** Laboratoire des Systèmes Mécaniques et d'Ingénierie Simultanée (LASMIS), Université de Technologie de Troyes

*** Laboratoire Mécanique et Matériaux (LMM), École Centrale de Nantes

Un modèle autocohérent élastoplastique a été développé pour étudier et analyser le comportement d'échantillons de zirconium 702 laminés soumis à une sollicitation mécanique. Les contraintes résiduelles d'origine thermique, induites par la baisse de la température de recuit à la température ambiante ont été déterminées et comparées aux résultats obtenus par diffraction des rayons X. Le comportement élastoplastique du Zr lors de tractions uniaxiales suivant la direction de laminage et la direction transverse a été simulé et confronté aux résultats expérimentaux. Le rôle de la texture et de la présence des contraintes thermiques sur la réponse du matériau a pu alors être étudié et expliqué.

■ INTRODUCTION

Les composés hexagonaux présentent une anisotropie thermique et plastique au niveau mésoscopique (échelle des grains) et macroscopique. Ces propriétés ajoutées à la prise en compte de la texture cristallographique du matériau expliquent l'apparition et le développement de contraintes résiduelles d'ordre II quand le polycristal est soumis à une sollicitation macroscopique. On distingue deux types de contraintes résiduelles :

- *Les contraintes résiduelles d'origine thermique* : lors du refroidissement qui suit un recuit, chaque grain va subir une contraction différente suivant son orientation cristallographique du fait de cette anisotropie. Pour maintenir la compatibilité entre grains adjacents et assurer la continuité du milieu, des déformations élastiques vont apparaître et engendrer des contraintes résiduelles permettant de satisfaire aux conditions de compatibilité de l'agrégat cristallin.
- *Les contraintes résiduelles d'origine mécanique* : elles sont induites par l'anisotropie plastique et la texture lorsque le matériau est soumis à une sollicitation mécanique.

Les contraintes d'origine thermique dans les alliages de zirconium, de part leur importance (1), vont avoir une influence sur le comportement mécanique du matériau (2-6). Ce phénomène doit donc être pris en compte pour mieux décrire son évolution quand il est soumis à une sollicitation.

Dans ce travail, nous avons étudié l'apparition et le développement des contraintes résiduelles sur des échantillons de Zr- α (Zr 702) laminés à froid puis recuits et soumis à une déformation plastique en traction uniaxiale. Un modèle autocohérent a été mis en place pour simuler les contraintes d'origine thermique et mécanique d'échantillons de zirconium soumis à des tests de traction uniaxiale suivant la direction de laminage (DL) et la direction transverse (DT). Les résultats de notre modèle ont été ensuite comparés à ceux obtenus par diffraction des rayons X et par les essais mécaniques.

■ CONTRAINTES RÉSIDUELLES D'ORIGINE THERMIQUE

Le but de cette étude est de déterminer l'évolution des contraintes résiduelles au cours du refroidissement. Nous supposons qu'à 923 K, le matériau est libre de toute contrainte et que les contraintes introduites par l'anisotropie thermique n'induisent pas de déformation plastique (1-5). La tôle de zirconium de notre étude a été soumise à un laminage suivi d'un recuit à 650°C pendant 4,5 h. La texture du matériau a été mesurée par diffraction des rayons X avec un goniomètre 4 cercles Kappa (7). La raie $K\alpha$ du cuivre a été utilisée. Les mesures sont effectuées pour des angles de déclinaison variant de 0 à 75° par pas de 5° et des angles azimutaux variant de 0 à 360° par pas de 5°. Les figures de pôles $\{0002\}$, $\{10\bar{1}1\}$, $\{11\bar{2}0\}$ et $\{10\bar{1}3\}$ ont été mesurées. Puis, les figures de pôles sont recalculées par la méthode harmonique. Dans nos modèles, la texture est prise en compte par l'intermédiaire d'une distribution discrète de 1 000 orientations Ω_i avec leurs fractions volumiques correspondantes f_i . Les constantes d'élasticité du monocristal de Zr sont données dans le *tableau I*. Les valeurs des coefficients de dilatation thermique sont reportées dans le *tableau II*.

TABLEAU I – Constantes d'élasticité du monocristal (en GPa) à 25°C (8).

TABLE I – Zirconium single-crystal stiffnesses (GPa) at room temperature (8).

C11	C12	C13	C33	C44	C66
143,5	72,5	65,4	164,9	32,1	35,5

TABLEAU II – Coefficients de dilatation thermique du monocristal de Zr ($\times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$) à 25°C (1).

TABLE II – Thermal expansion coefficients ($\times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$) at single crystal level and at room temperature (1).

Matériau	α_{11}	α_{22}	α_{33}
Zr	5,70	5,70	11,40

Pour tenir compte de la dépendance des constantes d'élasticité et des coefficients de dilatation du monocristal, nous avons utilisé les valeurs obtenues par Fischer & al (9) et Goldak & al (10).

Du point de vue expérimental, les mesures des déformations élastiques résiduelles ont été effectuées sur un goniomètre Siemens D500 pour un montage Ω . Les acquisitions des données ont été réalisées à l'aide d'un détecteur à scintillations et en utilisant un rayonnement K_{α} du chrome. Nous avons étudié deux plans cristallographiques : $\{10\bar{1}4\}$ ($2\theta = 156.67^\circ$) et $\{20\bar{2}2\}$ ($2\theta = 137^\circ$). Nous avons effectué les mesures en considérant trois directions ϕ différentes : 0° , 45° et 90° ($\phi = 0^\circ$ correspond à la direction de laminage). Pour chacune d'elles, nous avons pris 15 angles de déclinaison Ψ . Ceci permet alors de tracer les courbes de déformation en fonction de $\sin^2\Psi$. En première approximation, les déformations résiduelles d'origine thermique peuvent être représentées par des droites : $A + B\sin^2\Psi$. Étant donné la faible dispersion des points autour de ces droites, cette hypothèse peut être considérée comme correcte. Les résultats obtenus à partir de nos simulations et de nos mesures expérimentales sont regroupés dans le *tableau III*. Pour pouvoir déterminer les valeurs des déformations à partir des valeurs des angles de Bragg trouvés expérimentalement, il faut connaître les paramètres de maille du matériau non contraint. Ceux-ci n'étant pas accessibles expérimentalement à cause de l'anisotropie thermique, ils sont déterminés de telle sorte que la différence entre les valeurs de déformations expérimentales et calculées soit minimisée. Les valeurs obtenues par cette méthode sont : $a = 3,2363 \text{ \AA}$ et $c = 5,1498 \text{ \AA}$.

La *figure 1* montre l'évolution des déformations résiduelles pour les plans $\{10\bar{1}4\}$ et $\{20\bar{2}2\}$, pour la direc-

Figure 1 – Évolution des courbes $\varepsilon_{\phi\psi} = f(\sin^2\Psi)$ simulée et expérimentale pour un polycristal de zirconium macroscopiquement texturé pour $\phi = 0^\circ$ pour les plan cristallins $\{10\bar{1}4\}$ et $\{20\bar{2}2\}$. ● : plan $\{10\bar{1}4\}$ expérimental ; ▲ : plan $\{20\bar{2}2\}$ expérimental ; — : résultats simulés.

Figure 1 – Thermal residual strains vs. $\sin^2\Psi$ for $\{10\bar{1}4\}$ and $\{20\bar{2}2\}$ diffracting planes at room temperature. I : $\{10\bar{1}4\}$ diffracting plane – experimental results ; ● : $\{20\bar{2}2\}$ diffracting plane ▲ experimental results ; — : predicted results obtained using the self-consistent approach.

tion $\phi = 0^\circ$, déterminées par notre modèle et par l'expérience. Les valeurs simulées sont représentées par des droites étant donné la faible dispersion de ces points autour de celles-ci. Nous observons un bon accord entre les valeurs obtenues par notre modèle et celles obtenues par l'expérience.

L'anisotropie thermique induit un niveau de contraintes élevé. Si on regarde les valeurs des composantes des tenseurs des contrainte de chaque grain, environ 30 % des cristallites ont une composante σ_{33} supérieure à 80 MPa et une composante σ_{22} inférieure à -50 MPa. Les coefficients B donnés dans le *tableau III* sont équivalents à ceux produits par l'application d'une contrainte macroscopique $\Sigma_{11} = 90 \text{ MPa}$, soit environ 35 % de la limite d'élasticité du matériau. Les contraintes d'origine thermique à température ambiante vont donc jouer un rôle important en retardant ou en favorisant l'activation des systèmes de déformation durant la plasticité.

TABLEAU III – Coefficients A et B calculés et expérimentaux pour les plans $\{10\bar{1}4\}$ et $\{20\bar{2}2\}$ du Zr702.

TABLE III – Predicted and experimental A and B coefficients for $\{10\bar{1}4\}$ and $\{20\bar{2}2\}$ diffracting planes.

		Plan $\{20\bar{2}2\}$			Plan $\{10\bar{1}4\}$		
		$\phi = 0^\circ$	$\phi = 45^\circ$	$\phi = 90^\circ$	$\phi = 0^\circ$	$\phi = 45^\circ$	$\phi = 90^\circ$
Simul.	A ($\times 10^3$)	-0,84200	-0,84225	-0,83294	-0,02101	-0,02388	-0,03577
	B ($\times 10^3$)	1,15022	1,03106	0,93470	1,17819	1,00939	0,87753
Exp.	A ($\times 10^3$)	-0,90343	-0,78922	-0,81571	-0,02992	-0,04344	-0,06561
	B ($\times 10^3$)	1,65645	0,85342	0,80209	1,28388	1,03634	1,00242

■ CONTRAINTES RÉSIDUELLES DANS LE MATÉRIAU PRÉDÉFORMÉ

Pour mieux comprendre l'influence de la texture et de l'anisotropie thermique sur le comportement mécanique de notre matériau, nous avons effectué des essais de traction uniaxiale suivant la direction de laminage (DL) et la direction transverse (DT). Les échantillons ont été testés à température ambiante et à une vitesse de déformation constante de $3.8 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$. Les courbes de traction obtenues sont présentées sur la *figure 2*.

Parallèlement, un modèle autocohérent élastoplastique (5-11) a été mis en place pour prédire les effets de l'anisotropie thermique, plastique et de la texture sur le comportement de notre matériau. L'agrégat dans le modèle autocohérent est remplacé par un milieu homogène équivalent présentant les mêmes propriétés que le polycristal. Chaque grain est considéré comme une inclusion sphérique présentant des propriétés différentes suivant son orientation. Les propriétés du milieu homogène équivalent qui correspondent à des moyennes sur l'ensemble des inclusions sont déterminées par itération. Les systèmes de glissement et de maclage actifs sont déterminés à travers leurs scissions critiques. Nous supposons que chaque système de déformation a une scission critique initiale τ_c^g et que la loi d'écrouissage est définie par :

$$\dot{\tau}^g = H^g \sum_r \dot{\gamma}^r \quad [1]$$

où H^g est le coefficient d'écrouissage et $\dot{\gamma}^r$ la vitesse de glissement plastique du système r . Nos simulations ont été menées jusqu'à une déformation totale de 1 %.

Nous avons considéré dans nos calculs le glissement prismatique $\{10\bar{1}1\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$, le glissement pyramidal de

TABLEAU IV – Valeurs des scissions critiques τ_c^g (MPa) et des coefficients d'écrouissage H^g (MPa).

TABLE IV – CRSS and hardening coefficients (MPa) used in the simulation.

	τ_c^g (MPa)	H^g (MPa)
Glissement prismatique	118	69
Glissement pyramidal	190	150
Maclage	240	240

première espèce $\{10\bar{1}1\}\langle 11\bar{2}3 \rangle$ et le maclage de type $\{10\bar{1}2\}\langle \bar{1}011 \rangle$ (12).

Les valeurs de scissions critiques et de coefficients d'écrouissage utilisés sont reportées dans le *tableau IV*. Les courbes de traction prédites par notre modèle sont reportées sur la *figure 2*.

Les courbes de traction suivant la direction transverse et la direction de laminage présentent des caractéristiques différentes : la limite d'élasticité suivant DT est plus élevée, la transition élastoplastique est plus rapide et la courbe présente un plateau à partir de 0,6 % de déformation. Ces caractéristiques peuvent s'expliquer en termes de contraintes internes et de texture (5). Les valeurs expérimentales de limite d'élasticité suivant DL et DT sont respectivement de 205 et 290 MPa. Les valeurs des modules d'Young correspondants sont de 93 et 96 GPa. Ces valeurs sont peu différentes à cause de la faible anisotropie élastique du matériau. Les valeurs de limite d'élasticité prédites par notre modèle suivant DL et DT sont respectivement de 205 et 275 MPa et les valeurs simulées du module de Young de 93 et 95 GPa.

Figure 2 – Courbes de traction expérimentales et simulées suivant DL et DT.

Figure 2 – Experimental and calculated stress-strain curves for a tensile test in the rolling (RD) and transverse directions (DT) of the sample.

La différence de limite d'élasticité entre les deux directions peut être attribuée à la présence des contraintes résiduelles d'origine thermique. En effet, si nous négligeons dans nos calculs ces contraintes au départ, le modèle prévoit une différence de limite d'élasticité peu élevée ($< 15 \text{ MPa}$) due à la présence de la texture. Dans le *tableau V*, nous avons regroupé les activités moyennes des mécanismes de déformation pour les deux directions de sollicitation à 1 % de déformation. Pour les deux directions de sollicitation, le glissement prismatique est le mode principal de déformation. Le glissement pyramidal et le maclage de traction ont des activités moins importantes. La déformation est accommodée davantage par le glissement prismatique suivant la direction de laminage ; par contre, le glissement pyramidal s'active plutôt suivant DT (à 0,4 % suivant DT et à 0,7 % de déformation suivant DL) et de manière plus importante. Ces caractéristiques peuvent être attribuées à la texture de laminage initiale du matériau.

TABLEAU V – Activités moyennes en % des mécanismes à 1 % de déformation suivant la direction de sollicitation.

TABLE V – Proportions of activated systems (%) at 1 % total strain with a sollicitation along the rolling and transverse directions.

Direction de traction	prismatique	pyramidal	maclage
DL	83	16,5	0,5
DT	75	24	0,8

■ CONCLUSION

Les contraintes résiduelles d'origine thermique ont été évaluées sur une tôle de zirconium (Zr702) laminée puis recuite. Pour cela, nous avons utilisé un modèle autocohérent élastique. Nos simulations ont été ensuite comparées aux résultats expérimentaux de diffraction des rayons X. Ce modèle permet d'avoir une description réaliste des contraintes induites par l'anisotropie thermique au niveau de chaque grain. L'importance des contraintes ainsi engendrées nécessite leur prise en compte dans l'analyse ou la modélisation du comportement mécanique du matériau. Un modèle autocohérent élastoplastique a été utilisé pour simuler la réponse du matériau lors d'une traction uniaxiale suivant DL et DT. L'utilisation conjointe de ce modèle et des résultats expérimentaux a permis de déterminer l'influence de la texture et des contraintes internes sur la réponse du matériau. Cette étude a permis de confirmer l'aptitude du modèle autocohérent à déterminer les contraintes internes du matériau et d'expliquer le comportement de celui-ci. La suite de ce travail est de valider les hypothèses sur les systèmes de déformations activés dans nos simulations. Pour cela, nous avons soumis des éprouvettes de Zr à divers taux de déformation suivant les deux directions DL et DT. Des mesures de contraintes par DRX ont été effectuées sur ces éprouvettes prédéformées. Le couplage de ces résultats expérimentaux avec nos simulations permettra alors d'avoir une meilleure prévision et une bonne interprétation du comportement du matériau. Une étude similaire sur un autre composé de structure hexagonale, le Ti- α , a également été entreprise.

bibliographie

- (1) ORTIZ (M.) – POCHETTINO (A.A.) – **J. of Nucl. Mat.**, 229 (1996), p. 65-72.
- (2) Mac EWEN (S.R.), TOMÉ (C.), FABER (J.) – **Acta Mater.**, 37, n° 3 (1989), p. 979-989.
- (3) Mac EWEN (S.R.), CHRISTODOULOU (N.), SALINAS-RODRIGUEZ (A.) – **Metall. Trans.**, 21A (1990), p. 1083-1095.
- (4) TURNER (P.A.), TOMÉ (C.N.) – **Acta Mater.**, 42, n° 12 (1994), p. 4143-4159.
- (5) TURNER (P.A.), CHRISTODOULOU (N.), TOMÉ (C.N.) – **Int. J. of Plasticity**, 11, n° 3 (1995), p. 251-265.
- (6) PANG (J.W.L.), HOLDEN (T.M.), TURNER (P.A.), MASSON (T.E.) – **Acta Mater.**, 47, n° 2 (1999), p. 373-383.
- (7) GUILLEN (R.), COSSU (C.), FRANÇOIS (M.), GIRARD (E.) – **J. of Nucl. Mat.**, n° 255 (1998), p. 174-179.
- (8) SIMMONS (G.), WANG (H.) – Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties, Cambridge MA, M.I.T. Press (1971).
- (9) FISHER (E.S.), RENKEN (C.) – **Phys. Review**, n° 135 (1964), p. 484-494.
- (10) GOLDAK (J.), LLOYD (L.T.), BARRER (C.S.) – **Phys. Review**, 144, n° 2 (1966), p. 478-483.
- (11) LIPINSKI (P.), BERVEILLER (M.) – **Int. J. of Plasticity**, 5 (1989), p. 149-172.
- (12) TENCKOFF (E.) – Deformation mechanisms, texture and anisotropy in zirconium and zircaloy. STP 966, 1916 Race Street, Philadelphia, PA 19103 (1988).