

# Analyse multiéchelle du comportement élastoplastique du titane en compression

G. OUM<sup>a</sup>, D. GLOAGUEN<sup>a</sup>, V. LEGRAND<sup>a</sup>, S. BRANCHU<sup>a</sup>, T. PIRLING<sup>b</sup>, J. KELLEHER<sup>c</sup>, W. KOCKELMANN<sup>c</sup>

a. GeM, Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique, Université de Nantes, Ecole Centrale de Nantes, UMR CNRS 6183, 37 Boulevard de l'Université, BP 406, 44 602 Saint-Nazaire Cedex

b. Institut Laue Langevin, 6 rue Jules Horowitz, BP 156, 38042 Grenoble

c. ISIS, STFC Rutherford Appleton Laboratory, Chilton Didcot, Oxfordshire OX11 0QX, UK

## Résumé :

*Le comportement mécanique d'échantillons de titane (Ti- $\alpha$ ) a été étudié par un couplage entre un modèle auto-cohérent élastoplastique et la diffraction des neutrons. L'évolution des déformations élastiques intergranulaires et de la texture cristallographique a été analysée pour des essais de compression. Cette étude a permis de mieux appréhender le rôle de l'anisotropie plastique sur le comportement global du matériau en terme de mécanismes de déformation (glissements et maclage) activés suivant l'orientation cristallographique des grains constitutifs du volume diffractant analysé.*

## Abstract:

*Complementary methods were used to analyse intergranular strains and texture evolution in titanium samples which had undergone compression loadings: neutron diffraction and a modified elasto-plastic self-consistent model. The influence and the role of elastoplastic anisotropy on the global behaviour were studied in this work. The role of twinning and slip on the development of internal stresses is also discussed thanks to a comparison between the neutron diffraction results and the simulations.*

**Mots clefs : diffraction des neutrons, titane, plasticité, anisotropie, modélisation**

## 1 Introduction

Le titane, de structure cristallographique hexagonale, présente une anisotropie élastique et plastique tant au niveau macroscopique que mésoscopique (échelle des grains). Ces propriétés et l'existence d'une texture cristallographique expliquent l'apparition et le développement de déformations (ou contraintes) internes intergranulaires (ou d'ordre II) importantes quand ces matériaux sont soumis à une sollicitation élastoplastique.

Dans le cas de l'élastoplasticité, l'état de contrainte dépend de toute l'histoire de chargement du matériau. En effet, les contraintes résiduelles (ou les déformations élastiques associées) sont le résultat de l'ensemble des mécanismes de déformation ayant généré des incompatibilités de déformation. Le déplacement de la raie de diffraction va non seulement dépendre de la contrainte macroscopique mais également de la distribution des contraintes résiduelles inter et intragranulaire. La diffraction peut donc nous renseigner sur les sollicitations subies par le matériau et sur le comportement de celui-ci au travers d'informations à une échelle intermédiaire entre les échelles macroscopique et mésoscopique (ou microscopique). Pour la plasticité, on peut alors avoir des informations (indirectes) sur les mécanismes de déformations activés lors d'une sollicitation au niveau du volume diffractant et de mieux appréhender la complexité des mécanismes pouvant générer ces contraintes résiduelles. Cette technique constitue donc un outil pertinent pour valider et alimenter les modèles basés sur une démarche micromécanique par changement d'échelles. En retour, ces approches sont nécessaires pour interpréter correctement les données expérimentales obtenues [1,2]. Dans le cadre de ce travail, nous avons opté pour ce type de méthodologie pour mieux appréhender le rôle et l'influence de l'anisotropie plastique sur le comportement global d'échantillons de titane de pureté commerciale (Ti- $\alpha$ ) soumis à des essais de compression uniaxiale.

## 2 Diffraction des neutrons

Quand un matériau est sous contrainte (appliquée ou résiduelle), un changement dans les distances interréticulaires  $d$  a lieu en raison des déformations élastiques résultantes. Cette distance interréticulaire est utilisée comme jauge de déformation par les techniques de diffraction des neutrons. Cette déformation  $\langle \varepsilon(\text{hk.l}) \rangle_{V_d}$  du volume diffractant dans la direction de mesure, peut être déterminée à partir de la distance interréticulaire moyenne  $\langle d(\text{hk.l}) \rangle_{V_d}$  pour les cristallites ayant contribué à la diffraction pour un plan cristallographique  $(\text{hk.l})$  :

$$\langle \varepsilon(\text{hk.l}) \rangle_{V_d} = \frac{\langle d(\text{hk.l}) \rangle_{V_d} - d_0(\text{hk.l})}{d_0(\text{hk.l})} = 1 - \frac{\sin \langle \theta(\text{hk.l}) \rangle_{V_d}}{\sin \theta_0(\text{hk.l})} \quad (1)$$

où  $\theta_0(\text{hk.l})$  et  $d_0(\text{hk.l})$  représentent, respectivement, l'angle de diffraction et la distance interréticulaire du matériau non contraint et  $\langle \theta(\text{hk.l}) \rangle_{V_d}$  est la position angulaire du pic de diffraction après déformation.  $\langle \rangle_{V_d}$  correspond à une opération de moyenne sur le volume diffractant  $V_d$ .

Pour mieux comprendre l'influence de la texture et de l'anisotropie plastique sur le comportement mécanique de notre matériau, nous avons effectué des mesures in situ de déformations intergranulaires par diffraction des neutrons lors d'essais de compression uniaxiales à température ambiante jusqu'à un taux de déformation totale de -8 % en compression. Ces analyses ont été réalisées sur la ligne SALSA à l'ILL à Grenoble [3]. La longueur d'onde  $\lambda$  utilisée était de 1,648 Å avec un volume irradié de 3x3x3 mm<sup>3</sup>. Deux types d'analyses ont été effectués (FIG. 1.a) avec les éprouvettes placées de telle sorte que le vecteur de diffusion soit parallèle à la direction de sollicitation (i) ou perpendiculaire à celle-ci (ii). Il est alors possible de mesurer les déformations élastiques intergranulaires longitudinales et transversales pour une série de chargements appliqués. Différents plans cristallographiques ont été choisis pour suivre l'évolution du comportement mécanique de plusieurs groupes de cristallites : (10.0), (00.2), (11.0), (10.1), (10.2), (10.3), (20.1) et (11.2). Les matériaux hexagonaux comme le titane étant caractérisé par un fluage important du fait de leur comportement viscoplastique, il n'était pas possible d'effectuer les mesures durant le chargement. Pour éviter ce problème, les éprouvettes ont été soumises à divers taux de déformation macroscopique puis elles ont subi une décharge pour ramener la contrainte appliquée à 0 MPa avant d'effectuer la mesure de déformations pour les différents plans choisis. La courbe de chargement obtenue ainsi que les différents points d'analyse choisis pour la diffraction des neutrons sont présentés sur la figure 2.

Des analyses complémentaires ont également été effectuées sur la ligne ENGIN-X à ISIS au Rutherford Appleton Laboratory. L'axe de chargement est orienté horizontalement avec un angle de 45° par rapport au faisceau incident, permettant une mesure simultanée de la déformation élastique dans deux directions perpendiculaires (FIG. 1.b). Les mesures sont exécutées en utilisant la méthode de diffraction par temps-devol [4]. Une fente de dimensions 4x4mm<sup>2</sup> est utilisée afin de définir le faisceau de neutrons incident. Les collimateurs radiaux devant chaque détecteur définissent une ouverture de sortie des neutrons de 4 mm de largeur. Ainsi le volume étudié par la diffraction des neutrons est un cube de dimensions 4x4x4 mm<sup>3</sup>. Les différents plans analysés sont : (10.0), (00.2), (10.1), (10.2), (11.0), (10.3), (20.0), (11.2), (20.1), (20.2), (20.3), (21.0), (21.1), (11.4), (21.2), (10.4).

La texture cristallographique avant et après la déformation a été déterminée par diffraction des neutrons sur la ligne GEM à ISIS (FIG. 3) [5] pour quantifier l'activité du maillage.

### 3 Modèle autochérent élastoplastique

Nous avons utilisé l'approche autocohérente pour modéliser le comportement élastoplastique du titane. Dans ce type de schéma, les lois de comportement local et global s'expriment au travers des modules tangents élastoplastiques :

$$\dot{\sigma}^{\text{II}} = \ell : \dot{\varepsilon}^{\text{II}} \text{ et } \dot{\sigma}^{\text{I}} = \text{L} : \dot{\varepsilon}^{\text{I}} \quad (2)$$

L'exposant I (II) est utilisé pour les grandeurs macroscopiques (mésoscopiques).

La principale modification concerne la gestion des systèmes activés [6,7]. D'après le critère de Schmid généralisé, la formulation de l'activité d'un système de glissement est définie par :

$$\tau^{\text{g}} = \text{R}^{\text{g}} : \sigma^{\text{II}} = \tau_{\text{c}}^{\text{g}} \text{ et } \dot{\tau}^{\text{g}} = \text{R}^{\text{g}} : \dot{\sigma}^{\text{II}} = \dot{\tau}_{\text{c}}^{\text{g}} \quad (3)$$

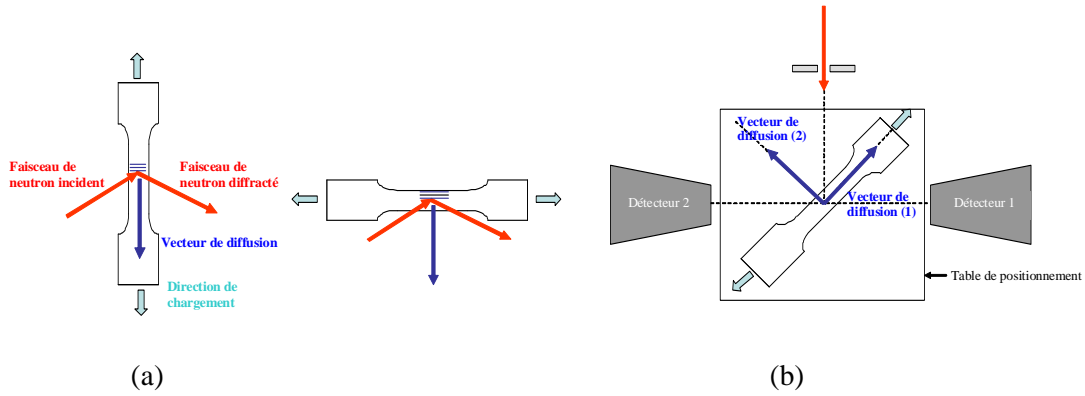


FIG. 1 - Schémas du principe des instruments SALS (a) et ENGIN-X (b)

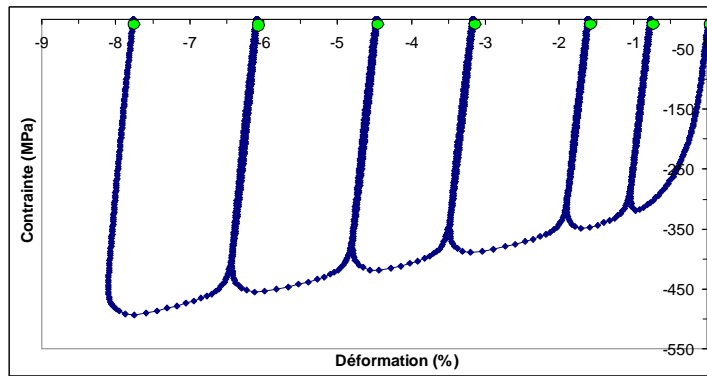


FIG. 2 - Courbe de compression, ● : points de mesure pour la diffraction des neutrons

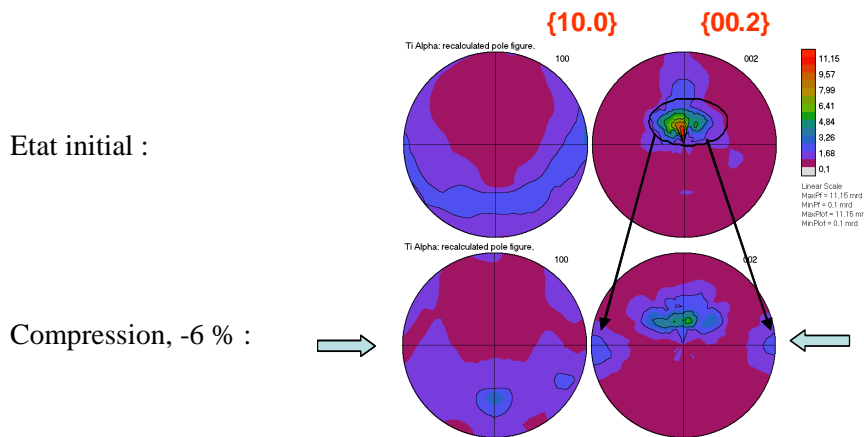


FIG. 3 - Figures de pôles expérimentales pour le plan prismatique et le plan basal à 0 % et -6 % de déformation totale. Mise en évidence du maillage de traction

$R^g$  est le tenseur de Schmid sur un système  $g$ ,  $\dot{\gamma}^g$  représente la vitesse de glissement sur le système  $g$ . On a pour les systèmes de déformation :

$$\tau^g < \tau_c^g \Rightarrow \dot{\gamma}^g = 0 \tag{4.a}$$

$$\tau^g = \tau_c^g \text{ et } \dot{\tau}^g < \dot{\tau}_c^g \Rightarrow \dot{\gamma}^g = 0 \tag{4.b}$$

$$\tau^g = \tau_c^g \text{ et } \dot{\tau}^g = \dot{\tau}_c^g \Rightarrow \dot{\gamma}^g > 0 \tag{4.c}$$

D'après ces critères, nous pouvons déterminer quelle sera la combinaison de systèmes de glissement réellement activés à n'importe quel moment de la déformation plastique. Un système sera actif si ses scissions réduite et critique ont les mêmes valeurs et les mêmes taux. Cependant, cette approche de la sélection des systèmes activés est très coûteuse en temps de calcul. En effet, il est alors nécessaire de

chercher la solution parmi toutes celles possibles par l'intermédiaire d'une technique d'analyse combinatoire. De plus, cette formulation n'assure pas l'unicité de la solution. Pour pouvoir obtenir des résultats numériques avec des temps raisonnables tout en ayant un polycristal modèle représenté par un nombre suffisant de grains, nous avons opté pour une nouvelle formulation pour décrire l'évolution de la plasticité. Elle est *inspirée* des lois développées pour la viscoplasticité en éliminant la notion de temps. Cette approche a été proposée par Ben Zineb & al. [6]. Les relations (4a), (4b) and (4c) peuvent alors s'écrire :

$$\dot{\gamma}^g = M^g (\tau^g, \tau_c^g) \dot{\tau}^g = M^g \dot{\tau}^g \quad (5)$$

De manière générale, en viscoplasticité, la vitesse de glissement est reliée à la scission réduite par une fonction  $M$  non linéaire ( $\dot{\gamma}^g = M(\tau^g) \tau^g$ ). Dans notre cas, pour avoir une formulation indépendante du temps, les vitesses sont reliées entre elles, il y a donc indépendance vis-à-vis du temps physique.

La gestion de l'activation ou non des systèmes de glissement est assurée par  $M^g$ . Cette fonction dépend de

$\frac{\tau^g}{\tau_c^g}$  et peut décrire l'écrouissage durant la plasticité.  $M^g$  est donnée par :

$$M^g = \beta \left[ \frac{1}{2} \left( 1 + \text{th} \left( k_0 \left( \frac{\tau^g}{\tau_c^g} - 1 \right) \right) \right) \right] \left[ \frac{1}{2} \left( 1 + \text{th} (k_0 \dot{\tau}^g) \right) \right] \left[ \frac{1}{2} \left( 1 + \text{th} (k_0 \tau^g) \right) \right] \quad (6)$$

$\beta$  et  $k_0$  sont des constantes du matériau. En tenant compte de (5), la loi de comportement local à l'échelle du grain est alors :

$$\dot{\varepsilon}^{\text{II}} = \left[ s + \sum_g (\mathbf{R}^g : \mathbf{M}^g : \mathbf{R}^g) \right] : \dot{\sigma}^{\text{II}} = \ell^{-1} : \dot{\sigma}^{\text{II}} \quad (7)$$

$\ell$  est le module tangent élastoplastique du monocristal. Ce tenseur dépend des systèmes actifs, des propriétés élastiques et plastiques du matériau. Les autres grandeurs sont déterminées par les relations usuelles données par l'approche autocohérente en tenant compte des relations (5) et (7).

Pour la prise en compte des différents modes de déformation, nous avons pris également en compte le maillage dans nos simulations en utilisant la méthode PTR (« Predominant twin reorientation method ») [8].

## 4 Résultats expérimentaux

### 4.1 Mise en évidence du maillage

L'activation du maillage de traction  $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}1 \rangle$  provoque une réorientation d'environ  $85^\circ$  de l'axe cristallographique  $c$  d'une cristallite induisant une variation opposée des intensités au niveau des plans (00.2) et (10.0) dans la direction de sollicitation macroscopique et les directions perpendiculaires à celle-ci. La figure 4 met en évidence l'activation du maillage de traction durant la compression. Cette figure montre l'évolution des intensités relatives en fonction de la déformation macroscopique pour les plans (10.0) et (00.2) dans les directions longitudinale (détecteur 1, axe de compression) et transversale (détecteur 2) mesuré sur ENGIN-X. Par soucis de clarté, les incertitudes sur les intensités ont été omises. Celles-ci sont toujours inférieures à 10%. Après -1% de déformation, l'intensité pour le plan (00.2) dans la direction longitudinale augmente significativement couplée avec une diminution continue de l'intensité pour le plan prismatique. Dans la direction transverse, un comportement exactement opposé est observé pour les deux plans analysés. Ce phénomène s'observe également sur les figures de pôles (figure 3) obtenues par diffraction des neutrons avec une réorientation des pôles dans la direction perpendiculaire à l'axe de sollicitation du fait de la texture initiale favorable pour ce type de mode de déformation en compression.

### 4.2 Evolution des déformations intergranulaires

Les évolutions des déformations intergranulaires résiduelles longitudinales et transversales (calculées avec la relation 1) sont présentées sur la figure 5. Par soucis de clarté, seuls quelques exemples de résultats obtenus ont été tracés.

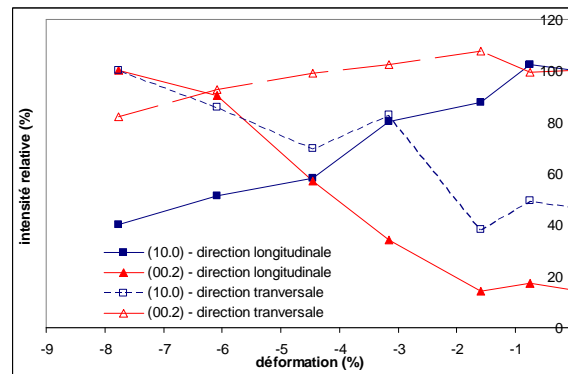
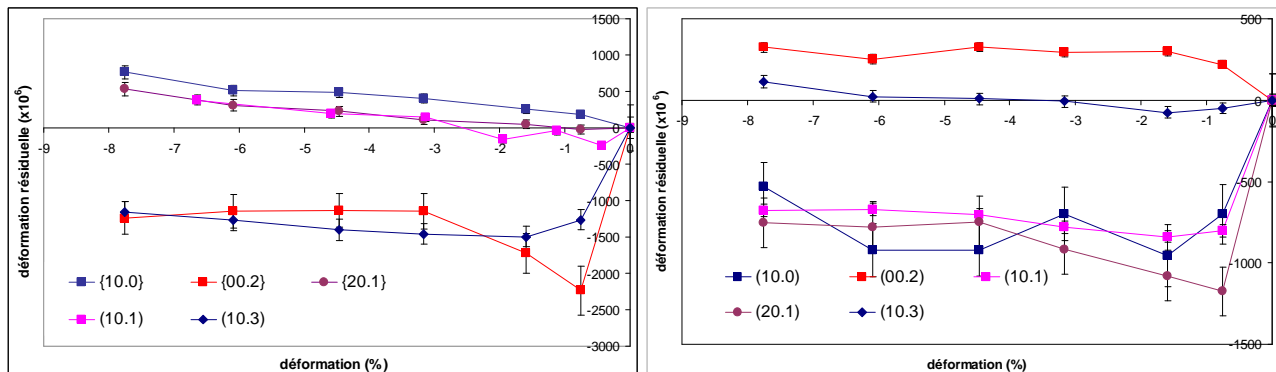


FIG. 4 - Evolution des intensités relatives pour les plans prismatique et basal dans les directions longitudinale (symboles pleins) et transversale (symboles vides) pour un essai de compression

Dans le cas de la compression, d'importantes déformations longitudinales de compression ( $\approx -1240 \mu\text{def}$ ) se développent dans les grains d'orientation (00.2) (c'est-à-dire les grains participant au volume diffractant pour le plan (00.2)). Pour le sens transverse, un comportement inverse est observé. Par exemple, les grains d'orientation (10.0) sont en compression avec des déformations de l'ordre de  $-550 \mu\text{def}$ . Ces déformations résiduelles apparaissent et se développent rapidement pour ensuite évoluer lentement. L'ensemble des résultats obtenus met en évidence une grande variété de comportement en terme de déformations (valeurs et/ou signe) suivant les groupes de cristallites analysées causée par la forte anisotropie plastique pour ce type de matériaux. Suivant le plan analysé, les groupes de cristallites concernées ont des orientations cristallographiques différentes (liées à la texture initiale du matériau). Elles vont donc être le siège d'activation de modes de déformation différents de manière plus ou moins importante suivant l'orientation par rapport à l'axe de sollicitation provoquant alors cette variété de résultats pour les champs de déformations élastiques mesurés. Ce type de résultats permet donc une validation des modèles à l'échelle fine du volume diffractant.

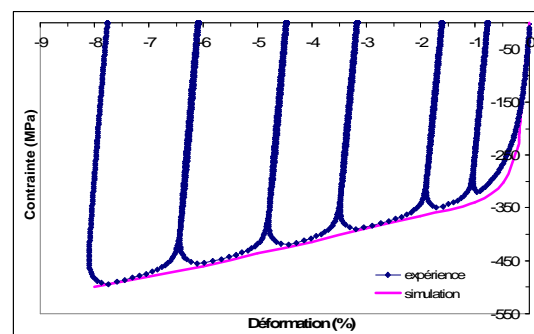
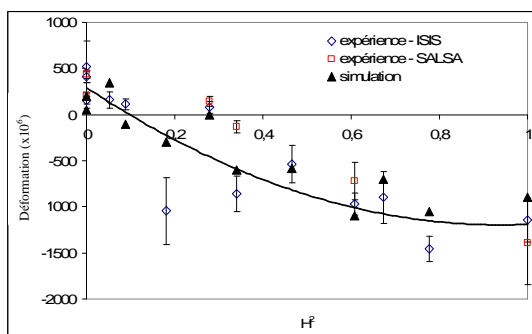


(a) (b)  
FIG. 5 - Exemples d'évolution des déformations intergranulaires longitudinales (a) et transversales (b) en fonction de la déformation macroscopique pour différents plans cristallographiques

## 5 Confrontation expérience - modélisation

Les systèmes de déformation choisis dans nos simulations sont le glissement prismatique  $\{10\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$  (noté pr<a>), le glissement pyramidal de type  $\langle c+a \rangle$   $\{10\bar{1}1\}\langle 11\bar{2}3 \rangle$  et  $\langle a \rangle$   $\{10\bar{1}1\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$  (notés respectivement pyr<c+a> et pyr<a>), le maclage de traction  $\{10\bar{1}2\}\langle 10\bar{1}1 \rangle$  (noté maclat) et le glissement basal  $\{0001\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$  (noté b). Une loi d'écroutissage linéaire est considérée :  $H^{\text{gr}}$  est égal à  $H^{\text{sg}}$  pour un mode de déformation donné  $r$  :  $\dot{\tau}^{\text{g}} = H^{\text{g}} \sum_r \dot{\gamma}^r$ . A partir de la FDO expérimentale, nous avons sélectionné 2000 orientations représentatives de la texture effective du matériau pour le modèle autocohérent. Nous avons effectué différentes simulations numériques en faisant varier ces paramètres pour favoriser à tour de rôle un ou plusieurs systèmes de déformation. Ensuite les résultats numériques sont comparés aux résultats

expérimentaux en termes d'évolution de déformations résiduelles. La diffraction permet d'avoir pour la validation de nos simulations et de nos paramètres, un critère de sélection beaucoup plus sévère et pertinent que des courbes de chargement macroscopique. La diffraction donne des informations sur le comportement mécanique au niveau mésoscopique du matériau. Le choix de différentes combinaisons de systèmes de déformation entraîne des résultats différents au niveau de nos simulations des déformations suivant la direction d'analyse. La diffraction nous permet alors de sélectionner quels sont les systèmes possibles ou non pour reproduire le comportement réel du matériau. Nous avons cherché à identifier tour à tour si des systèmes de déformation étaient prédominants. La hiérarchie des systèmes de déformation permettant de reproduire au mieux l'intégralité des résultats expérimentaux (courbes de chargement, résultats de diffraction) est :  $\tau^{pr<a>} < \tau^b < \tau^{maclet} < \tau^{pyr<c+a>}$ . La figure 6.b présente une comparaison entre les courbes de compression expérimentales et prédites. A titre d'illustration, la figure 6.a montre la comparaison entre les déformations intergranulaires longitudinales prédites et expérimentales en fonction du paramètre  $H^2$ . Un bon accord est observé pour ce cas. Le modèle arrive à reproduire le comportement à l'échelle du volume diffractant pour les plans cristallographiques analysés dans ce cas. Le plus grand écart est observé pour  $H^2 = 0,18$  (plan (21.2)).



(a) Evolution des déformations intergranulaires longitudinales expérimentales et prédites après une déformation de  $-3,5\%$ , (b) Courbes de compression expérimentale et prédite pour le Ti- $\alpha$

Des comparaisons similaires ont également été faites pour les autres résultats expérimentaux présentés dans le chapitre IV. Celles-ci montrent que la hiérarchie des modes de déformation choisis dans le cadre de ce travail permet d'expliquer l'évolution des déformations dans les directions longitudinale et transversale pour la compression pour la majorité des plans cristallins analysés.

## 6 Conclusion

Le comportement du Ti- $\alpha$  a été étudié en plasticité durant des essais de compression. La confrontation des résultats de diffraction avec les simulations numériques a permis de reproduire et d'expliquer un certain nombre d'observations expérimentales. Le glissement prismatique comme mode de déformation majoritaire explique le comportement au niveau du volume diffractant et ceci pour les plans cristallographiques étudiés suivant les 2 directions d'analyse. Le même jeu de paramètres (scissions critiques, matrice d'écroutissage, ...) a permis de déterminer le comportement, aux différents taux de déformation étudiés, pour la majorité des plans analysés durant cette étude.

## Références

- [1] J.R. Cho, D. Dye, K.T. Conlon, M.R. Daymond, C.R. Reed, *Acta Mater.*, 50 (2002), 4847-4864.
- [2] F. Xu, R.A. Holt, M.R. Daymond, *Acta Mater.*, 56 (2008), 3672-3687.
- [3] T. Pirling, G. Bruno, P.J. Withers, *Mater. Sci. Eng. A*, 437 (2006), 139-144.
- [4] J.R. Santisteban, M.R. Daymond, J.A. James, L. Edwards, *J. Appl. Cryst.*, 39 (2006), 812-825.
- [5] W. Kockelmann, L.C. Chapon, P.G. Radaelli, *Physica B*, 385-386 (2006), 639-643.
- [6] T. Ben Zineb, S. Arbab Chirani, M. Berveiller, 15<sup>ème</sup> congrès français de mécanique, Nancy, 2001.
- [7] P. Lorrain, T. Ben Zineb, F. Abed-Meraim, M. Berveiller, *Int. J. Forming Proc.* 8, 2-3 (2005), 135-158.
- [8] C.N. Tomé, R.A. Lebensohn, U.F. Kocks, *Acta Metall.* 39 (1991), 2667-2677.