

Approche expérimentale et numérique de la plasticité des verres métalliques massifs

J.-S. Brest^{ab}, P. Longère^a, V. Keryvin^b, Y. Yokoyama^c

a. Université de Toulouse, Institut Supérieur de l'Aéronautique de l'Espace, ICA EA 814

b. Université Européenne de Bretagne, Université de Bretagne-Sud, LIMATB EA 4250

c. Tohoku University, Institute for Material Research, LAM, Japan

Résumé :

Le premier objectif des travaux présentés ici est l'étude du comportement mécanique du verre métallique massif $Zr_{55}Cu_{30}Al_{10}Ni_5$. Son comportement macroscopique étant fragile à température ambiante aussi bien en traction qu'en compression, l'étude de sa plasticité microscopique nécessite l'utilisation d'essais mécaniques multi-axiaux générant des états de contrainte hétérogènes au sein de l'échantillon. Des essais d'indentation et de compression diamétrale ont ainsi été réalisés et des simulations numériques ont été menées au moyen du code de calcul industriel Abaqus. Les résultats numériques obtenus en considérant différents modèles constitutifs, implémentés en tant que lois utilisateurs (UMAT), sont commentés et comparés aux résultats expérimentaux.

Abstract :

The first objective of the present work is to study the mechanical behaviour of the bulk metallic glass $Zr_{55}Cu_{30}Al_{10}Ni_5$. Its macroscopic behaviour being brittle at room temperature in tension as well as in compression, studying its microscopic plasticity requires the use of multi-axial tests involving heterogeneous stress states. Experimental indentation and diametral compression tests were consequently carried out and simulations were conducted using the engineering computation code Abaqus. The numerical results obtained considering different constitutive models implemented as user material (UMAT) are compared with experimental results.

Mots clefs : Verres métalliques massifs ; compression diamétrale ; indentation

1 Introduction

Les verres métalliques massifs (VMM) sont des matériaux récents possédant des propriétés mécaniques remarquables. Leurs résistance mécanique, énergie élastique stockée, dureté, ténacité ou encore déformation élastique [5] sont particulièrement élevées. La conception de nouvelles compositions de verres métalliques qui soient à la fois plus résistants et ductiles nécessite une parfaite compréhension des mécanismes de déformation, d'endommagement et de rupture. Une modélisation avancée est de fait nécessaire à la prédiction numérique du comportement de ces matériaux. Les VMM sont caractérisés par l'absence d'ordre à moyenne et longue distance, contrairement aux métaux cristallins. Dans le cas des VMM, la plasticité est liée à la propagation et à l'interaction de fines bandes de cisaillement. A partir de la théorie des zones de transformation par cisaillement ou de celle du volume libre, plusieurs tentatives de modélisation du comportement des VMM ont été proposées, voir p. ex. Schuh et al. [5]. Anand et Su [1] ont quant eux proposé une modélisation basée sur les mécanismes de glissement.

Nous avons réalisé des essais d'indentation et de compression diamétrale sur un VMM à base Zirconium, de composition $Zr_{55}Cu_{30}Al_{10}Ni_5$ (at. %). Des simulations numériques de ces essais ont été menées au moyen du code de calcul industriel Abaqus en utilisant différents modèles de complexité croissante, implémentés en tant que lois utilisateurs (UMAT) et dont les résultats numériques obtenus

après identification des constantes matériaux de ces différents modèles sont commentés et comparés aux résultats expérimentaux.

2 Résultats expérimentaux

L'essai d'indentation, dont la courbe de force-déplacement est tracée en figure 1 (b), a été réalisé au moyen d'un indenteur micro-Vickers, voir la technique dans [3]. Les essais de compression diamétrale présentés ici sont réalisés à température ambiante et pression atmosphérique, sur une machine de traction-compression hydraulique. Des caméras permettent de suivre les déplacements locaux de l'éprouvette (résolution de 0,25 mm), et d'en déduire les champs de déformation à l'aide du logiciel de corrélation d'images (DIC aramis).

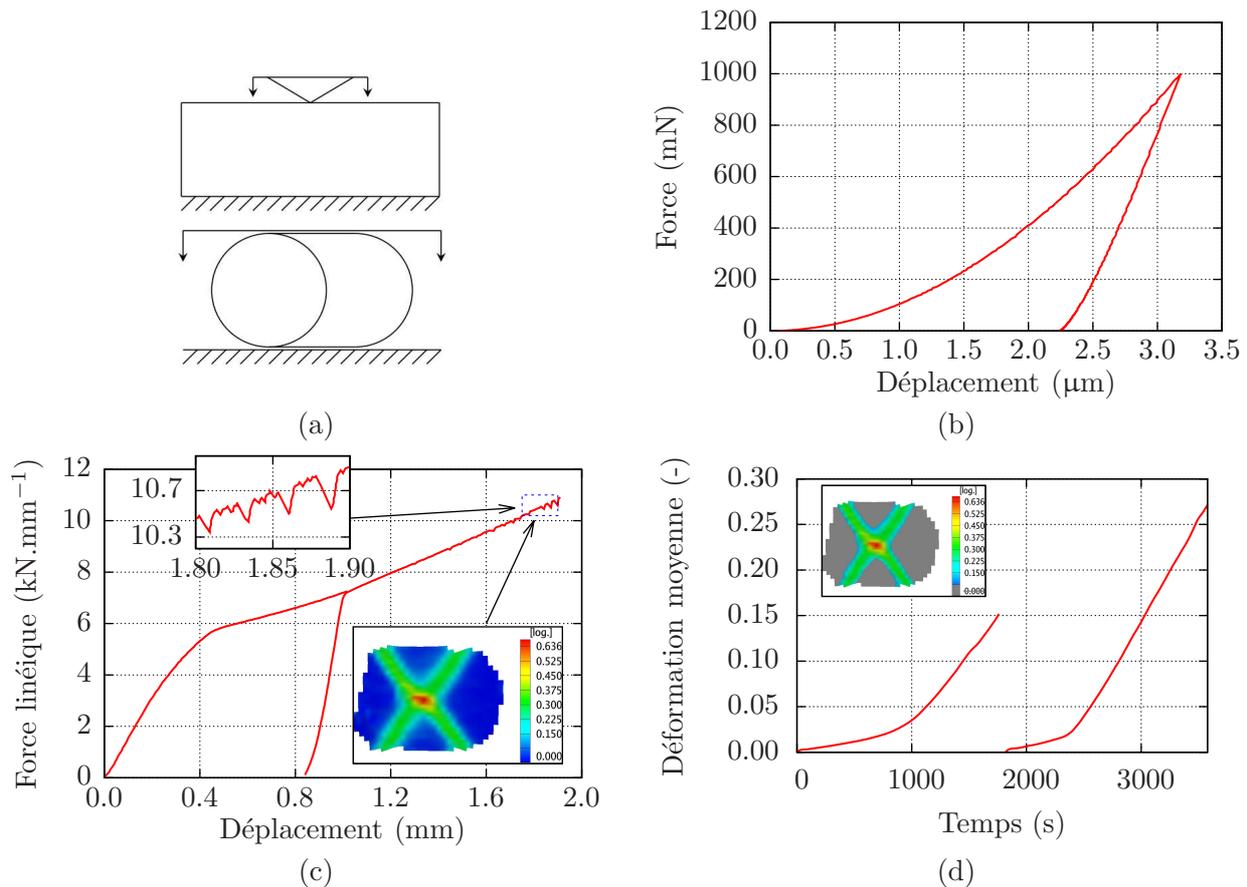


FIGURE 1 – Résultats expérimentaux. (a) Principe des essais d'indentation (haut) et de compression diamétrale (bas). (b) Force-déplacement pour l'essai d'indentation. (c) Force-déplacement pour l'essai de compression diamétrale. (d) Déformation-temps pour l'essai de compression diamétrale.

Deux courbes caractéristiques tracées en figure 1 (c) et (d) sont obtenues à partir de l'essai de compression diamétrale. La courbe force déplacement en figure 1 (c) met en évidence une première partie caractérisée par une rigidité importante et une seconde par une rigidité plus faible. L'agrandissement des derniers instants avant rupture permet d'observer la présence de dentelures d'intensité croissante, conséquences de la formation et de l'émergence de bandes de cisaillement au sein du matériau.

La figure 1 (d) présente l'histoire de la déformation de glissement équivalente moyenne calculée par le dispositif de corrélation d'image ($\varepsilon^{eq} = \sqrt{\frac{2}{3}}\varepsilon$: ε où ε représente la partie déviatorique du tenseur des déformations ε). Cette moyenne est réalisée sur la croix où se concentre la majeure partie de la déformation (la partie grisée figure 1 (d) est exclue). Cette déformation dépasse localement les 0,6. L'épaisseur réelle des bandes (10-100 nm [5]) étant largement inférieure à la résolution obtenue par corrélation d'image (0,25 mm), les déformations dans ces bandes sont bien plus élevées.

3 Simulation numérique

De nombreux modèles existent permettant de décrire le comportement des métaux cristallins, des polymères ou des céramiques, mais peu d'entre eux sont adaptables aux verres métalliques et le nombre de modèles dédiés aux métaux amorphes est encore plus restreint puisqu'il existe de nombreuses inconnues pour comprendre parfaitement les mécanismes à l'origine de leur déformation. Notre approche a consisté à utiliser des modèles à la difficulté croissante : le modèle de Mises (VM) qui fait intervenir la contrainte déviatorique, le modèle de Drucker Prager (DP) qui prend en compte les effets de la pression et le modèle de Anand et Su [1] (AS) dédié aux métaux amorphes.

Les équations permettant de décrire les différents modèles sont présentées ici. Le taux de déformation $\dot{\xi}$ est décomposé en une partie réversible $\dot{\xi}^e$, et une partie inélastique $\dot{\xi}^p$. L'hypothèse des petites perturbations pour une loi d'élasticité isotrope permet d'écrire :

$$\dot{\xi} = \dot{\xi}^e + \dot{\xi}^p \quad \text{avec} \quad \dot{\xi}^e = \frac{1+\nu}{E} \dot{\sigma} - \frac{\nu}{E} (\text{tr } \dot{\sigma}) \delta \quad (1)$$

σ représente le tenseur des contraintes de Cauchy qui se décompose ainsi $\sigma = \underline{s} - p \delta$, avec \underline{s} la partie déviatorique de σ , p la pression et δ le tenseur identité d'ordre deux. E et ν sont respectivement le module de Young et le coefficient de Poisson. L'absence d'écrouissage [5] nous amène à considérer les modèles de VM et DP comme élasto-plastiques parfaits :

$$f_M(\sigma_{eq}) = \sigma_{eq} - \sigma_0 \leq 0 \quad ; \quad f_{DP}(\sigma_{eq}, p) = \sigma_{eq} - p \tan \varphi - \sigma_0 \leq 0 \quad (2)$$

où $\sigma_{eq} = \sqrt{\frac{3}{2} \underline{s} : \underline{s}}$: \underline{s} représente la contrainte équivalente en cisaillement, σ_0 la contrainte d'écoulement. φ est l'angle de friction interne. Les taux de déformation plastique s'écrivent respectivement :

$$\dot{\xi}^p = \dot{\lambda} \frac{\partial f_M}{\partial \sigma} = \frac{3}{2} \dot{\lambda} \frac{\underline{s}}{\sigma_{eq}} \quad ; \quad \dot{\xi}^p = \dot{\lambda} \frac{\partial f_{DP}}{\partial \sigma} = \dot{\lambda} \left(\frac{3}{2} \frac{\underline{s}}{\sigma_{eq}} - \frac{1}{3} \tan \psi \delta \right) \quad (3)$$

où $\dot{\lambda} \geq 0$ est le multiplicateur plastique. En règle générale (plasticité non associée) pour le modèle de DP, le taux de déformation inélastique est en effet déduit du potentiel $g_{DP}(\sigma_{eq}, p) = \sigma_{eq} - p \tan \psi$ (avec ψ l'angle de dilatance). Dans la suite nous nous plaçons dans le cadre de la plasticité associée, *i.e.* $\psi = \varphi$.

Le modèle proposé par Anand et Su [1] est spécifique aux matériaux amorphes. Il cherche à reproduire l'écoulement anisotrope d'un matériau sensible à la contrainte de cisaillement et à la contrainte normale *i.e.* générant des déformations de cisaillement et de la dilatance irréversibles. Il est sans seuil, la déformation plastique y est négligeable durant la phase pseudo-élastique. Le taux de déformation plastique macroscopique est donné par :

$$\dot{\xi}^p = \sum_{\alpha=1}^6 \dot{\gamma}^{(\alpha)} \left\{ \underline{G}^{(\alpha)} + \beta \underline{M}^{(\alpha)} \right\} \quad ; \quad \underline{G}^{(\alpha)} = \text{sym} \left[\underline{g}^{(\alpha)} \otimes \underline{m}^{(\alpha)} \right] \quad ; \quad \underline{M}^{(\alpha)} = \underline{m}^{(\alpha)} \otimes \underline{m}^{(\alpha)} \quad (4)$$

où α représente le système de glissement considéré (\otimes est le produit tensoriel). $\underline{m}^{(\alpha)}$ et $\underline{g}^{(\alpha)}$ la normale au $\alpha^{\text{ième}}$ plan de glissement et sa direction, respectivement. Le taux de cisaillement $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ sur le système de glissement α est exprimé par une loi Norton visqueuse avec un coefficient de résistance de type Mohr-Coulomb :

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{(\alpha)}}{c + \mu \sigma^{(\alpha)}} \right)^{1/m} > 0 \quad ; \quad \dot{\gamma} = \sum_{\alpha=1}^6 \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad ; \quad c = c_{cv} + b \left(1 - \frac{\eta}{\eta_{cv}} \right)^q \quad ; \quad c(0) = c_{cv} + b \quad (5)$$

où $\tau^{(\alpha)} = \sigma : \underline{G}^{(\alpha)}$ and $\sigma^{(\alpha)} = -\sigma : \underline{M}^{(\alpha)}$ représentent respectivement la contrainte de cisaillement résolue et la contrainte normale au plan de glissement α . La quantité $\dot{\gamma}_0$ est une contrainte de cisaillement de référence. m est la sensibilité à la vitesse de déformation, volontairement choisie faible pour obtenir un comportement quasi visco-indépendant. La constante μ est le coefficient de frottement

interne. $c(0)$ est la valeur de cohésion initiale qui se compose de la cohésion finale c_{cv} à laquelle on ajoute une surcontrainte b . Les paramètres q et p sont des constantes matériaux positives de l'ordre de l'unité. Dans (4) β est le paramètre qui contrôle l'amplitude de la dilatance plastique :

$$\beta = g_0 \left(1 - \frac{\eta}{\eta_{cv}}\right)^p \quad ; \quad \dot{\eta} = \beta \dot{\gamma} \quad (6)$$

La valeur initiale de β est g_0 ce qui implique que la déformation inélastique est une combinaison du glissement plastique et de la dilatation plastique ; ce paramètre tend vers 0 lorsque la déformation plastique volumique η atteint une limite η_{cv} (réduction maximale de la densité résultant de la déformation plastique) menant à une déformation plastique uniquement liée au glissement plastique. g_0 est un paramètre permettant de dissocier le comportement en traction (g_{0t}) et en compression (g_{0c}).

4 Procédure

Les simulations sont réalisées à l'aide du code de calcul par éléments finis Abaqus. Les modèles de VM et DP figurent parmi la bibliothèque des matériaux standards d'abaqus. Le modèle de AS a quant à lui nécessité la création d'une routine utilisateur (UMAT) dans Abaqus. Les essais présentés ont été modélisés en 2 dimensions par des éléments en contraintes planes à intégration réduite pour l'essai de compression diamétrale (CPS4R) avec les modèles de VM et DP, et des éléments en déformations planes à intégration réduite (CPE4R) avec le modèle de Anand. Pour l'essai d'indentation, des éléments axisymétriques à intégration réduite (CAX4R) sont utilisés. Les résultats obtenus avec les modèles de VM et DP sur l'essai de compression diamétrale ont été corrigés afin de correspondre à des simulations en 3 dimensions. Ces courbes de correction ont été déterminées en comparant des simulations en deux et trois dimensions pour différentes valeurs de la contrainte σ_0 (voir (2)) et différents écarts entre les limites en traction et en compression.

Afin de déterminer les constantes plastiques matériau, un logiciel d'identification (SiDoLo [2]) a été utilisé. Les valeurs de σ_0 des modèles de VM et DP ont ainsi été déterminées, ainsi que la cohésion et le coefficient de frottement interne du modèle de AS. Les paramètres élastiques sont quant à eux fixés et ont été déterminés dans une étude précédente [4]. Pour l'essai de compression diamétrale, seule la première charge est utilisée pour les identifications. Le modèle de AS ne permet pas de réaliser une identification sur la déformation de glissement moyenne, les résultats présentant une dépendance pathologique à la taille de mailles du fait de l'adoucissement.

Les paramètres utilisés sont indiqués dans le tableau 1 (les paramètres de plasticité identifiés sont quant à eux indiqués en tableau 2).

E (MPa)	ν (-)	μ (-)	$\dot{\gamma}_0$ (s^{-1})	m (-)	g_{0c} (-)
85000	0.37	ID	0.001	0.005	0.04
g_{0t} (-)	η_{cv} (-)	p (-)	c_0 (MPa)	b (MPa)	q (-)
0.4	0.005	0.8	ID	300	1.2

TABLE 1 – Paramètres utilisés pour les différents modèles.

A chacune des courbes expérimentales (figure 1) correspond une identification et donc un jeu de coefficients. Les courbes expérimentales et numériques pour les trois grandeurs considérées sont tracées en figure 2. Qualitativement les identifications permettent d'obtenir des courbes numériques et expérimentales très proches. On notera cependant que pour l'essai d'indentation la décharge est plus rigide d'un point de vue numérique, quel que soit le modèle.

L'étude des coefficients obtenus sur ces différents essais permet de relever des différences entre les modèles. Si la comparaison entre les modèles de VM et DP est aisée, trouver une correspondance entre les coefficients décrivant la plasticité pour ces deux modèles et celui de AS s'avère plus complexe. Les valeurs obtenues après identification sont rassemblées dans les tableaux 2. La limite d'élasticité obtenue sur l'essai d'indentation avec le modèle de VM est légèrement plus importante que les limites obtenues avec le modèle de DP. On peut traduire les valeurs obtenues avec le modèle de AS par

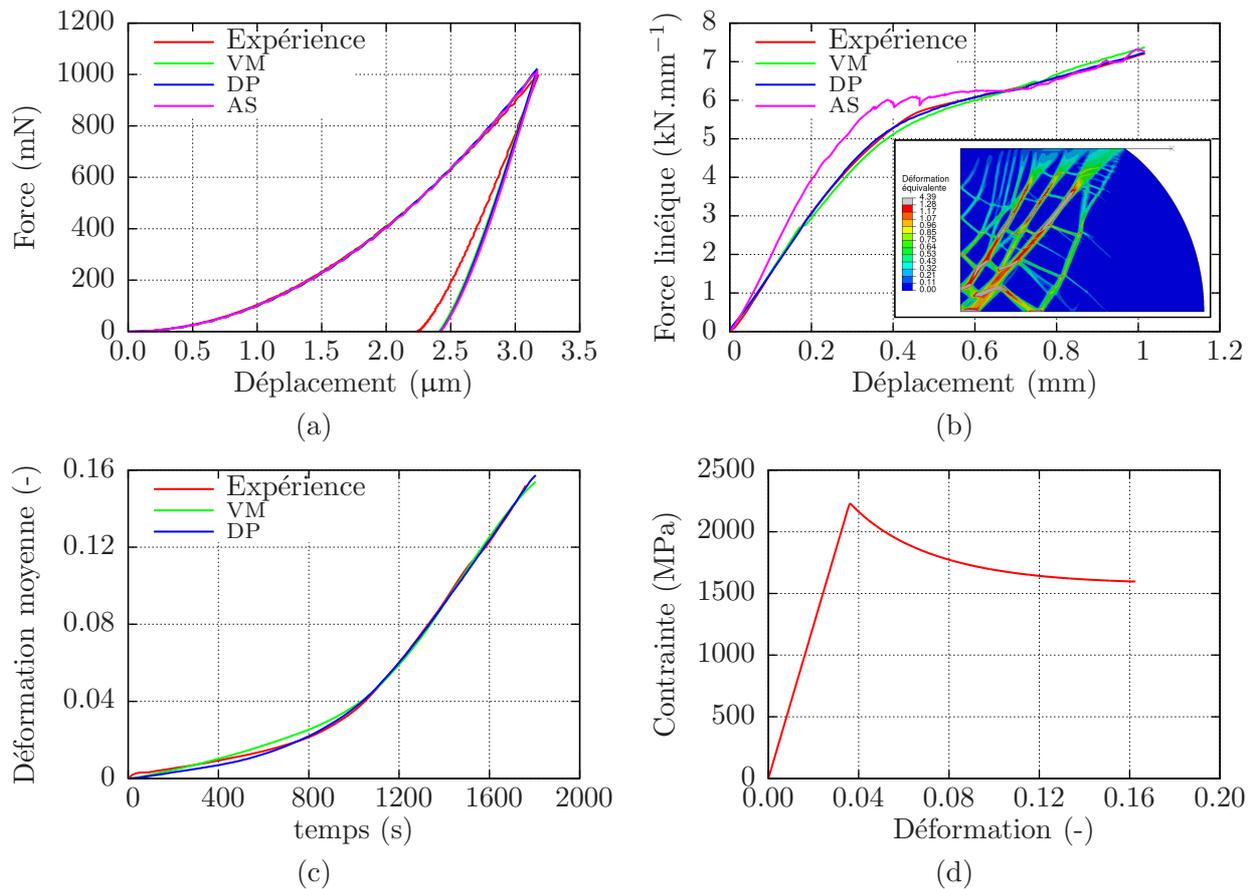


FIGURE 2 – Résultats numériques. Confrontation à l'expérience. (a) Force-déplacement pour l'essai d'indentation. (b) Force-déplacement pour l'essai de compression diamétrale - carte des déformations équivalentes obtenues avec le modèle de AS. (c) Déformation-temps pour l'essai de compression diamétrale. (d) Courbe type de l'évolution de la contrainte en fonction de la déformation en compression avec le modèle de AS.

une contrainte seuil d'environ 2200 MPa suivie par un adoucissement qui fait chuter la contrainte à environ 1600 MPa comme illustré sur la courbe numérique 2 (d). Les coefficients obtenus avec l'essai de compression diamétrale sont plus faibles avec les modèles de DP et VM, et proches avec celui de AS. Les deux premiers donnent des résultats qualitatifs très proches, le modèle de AS est quant à lui plus raide sur la première partie de la courbe. Sur l'identification réalisée à partir de la déformation de glissement, la contrainte seuil du modèle de VM est deux fois plus importante que celle du modèle de DP. Les différents coefficients plastiques obtenus avec le modèle de VM montrent une disparité très importante de ce seuil d'écoulement, ce qui montre son incapacité à décrire le comportement du verre métallique considéré dans cette étude. Les résultats obtenus avec les modèles de DP et AS sont eux plus consistants, ce qui confirme l'importance de la prise en compte de la pression dans le comportement des verres métalliques.

5 Conclusion

Cette étude met en évidence l'intérêt du test de compression diamétrale dans l'étude de la plasticité des verres métalliques massifs. Cet essai hétérogène permet d'observer le comportement plastique du matériau en dépit sa fragilité apparente, ce qui n'est pas possible avec des essais conventionnels (traction et compression uniaxiales). Il permet l'utilisation d'un dispositif de corrélation d'images qui offre la possibilité de suivre les champs de déformation durant l'essai, complétant la réponse en force obtenue. Son association avec le test d'indentation permet de comparer des résultats avec des taux de triaxialité très différents. Ce dernier concentre un champ de contrainte de type compression sous

Von Mises	Drucker Prager		Anand et Su		
σ_y (MPa)	σ_{yc} (MPa)	σ_{yt} (MPa)	c (MPa)	μ (-)	(a)
2020	1745	1640	1030	0.056	

Von Mises	Drucker Prager		Anand et Su		
σ_y (MPa)	σ_{yc} (MPa)	σ_{yt} (MPa)	c (MPa)	μ (-)	(b)
1555	1565	1290	1080	0.057	

Von Mises	Drucker Prager		
σ_y (MPa)	σ_{yc} (MPa)	σ_{yt} (MPa)	(c)
3430	1435	1145	

TABLE 2 – Coefficients matériau identifiés (a) sur l’essai d’indentation (b) sur l’essai de compression diamétrale. Donnée : Force (c) sur l’essai de compression diamétrale. Donnée : Déformation.

la pointe de l’indenteur, pendant que l’essai de compression diamétrale associe de la traction, de la compression et du cisaillement. La capacité de cet essai à générer une plasticité importante (ici de l’ordre de 0,8 au centre de l’éprouvette) est un atout indéniable dans l’étude des verres métalliques massifs.

Les différents modèles étudiés pour reproduire les essais expérimentaux mettent en évidence l’importance de la prise en compte de la pression dans le comportement des verres métalliques. Les modèles de Drucker Prager et Anand et Su se sont montrés les plus à même de reproduire leur comportement. Pour poursuivre cette étude, plusieurs options sont envisageables. D’un point de vue expérimental, définir un nouvel essai nous permettrait de mettre à l’épreuve les différents modèles identifiés. Numériquement, coupler les différentes simulations permettrait d’obtenir un seul jeu de coefficients par modèle.

Références

- [1] Anand, L., Su C. 2005 A theory for amorphous viscoplastic materials undergoing finite deformations, with application to metallic glasses. *J. Mech. Phys. Solids* **53** 1362-1396
- [2] Cailletaud, G., Pilvin, P. 1993 Identification and inverse problems : a modular approach. *ASME Winter Meeting* pp. 33-45, New Orleans, Louisiana.
- [3] Keryvin, V. Indentation of bulk metallic glasses : relationships between shear-bands observation at the surface and hardness. 2007 *Acta Mater.* **57** 2565-2578
- [4] Keryvin, V., Rouxel, T., Huger, M., Charleux, L. Elastic moduli of a ZrCuAlNi bulk metallic glass from room temperature to complete crystallisation by in situ pulse-echo ultrasonic echography. 2008 *J. Ceram. Soc. Jap.* **116** 851-854
- [5] Schuh, C. A., Hufnagel, T. C., Ramamurty, U. Mechanical behavior of amorphous alloys. 2007 *Acta Mater.* **55** 4067-4109

Ce travail a été cofinancé par la DGA et la Région Bretagne (CODYVER). Les auteurs remercient également l’Université Européenne de Bretagne (EPT COMDYNVER).