

# Modélisation multiéchelle de l'influence de la texture morphologique sur l'analyse des contraintes en diffraction des rayons X et des neutrons

V. HOUNKPATI, S. FREOUR, D. GLOAGUEN, V. LEGRAND

LUNAM Université - Université de Nantes - Centrale Nantes  
Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique (UMR CNRS 6183),  
Equipe Etat Mécanique et Microstructure,  
37 boulevard de l'Université - BP 406 - 44602 Saint-Nazaire cedex, France

## Résumé :

*Dans ce travail, nous proposons une étude sur l'influence de la texture morphologique sur la détermination des contraintes résiduelles par diffraction dans les matériaux métalliques de symétries cubique et hexagonale. Pour cela, un modèle autocohérent élastique a été développé afin de prendre en compte la texture morphologique. Plusieurs morphologies (sphère, fibre et disque) ont été étudiées, puis couplées avec la texture cristallographique afin de rendre compte de l'effet combiné des textures morphologique et cristallographique en élasticité. Dans le cas de la texture morphologique, une influence plus marquée que la texture cristallographique en termes de contraintes résiduelles (plusieurs dizaines de MPa de différence) a été observée.*

## Abstract :

*In this work, a study on the influence of morphological texture on the determination of residual stresses by diffraction in metallic materials with cubic and hexagonal symmetry is proposed. To this end, an elastic self-consistent model has been developed to take into account the morphological texture. Different Extreme morphologies (sphere, disc and fiber) were studied, and coupled with the crystallographic texture to reflect the combined effect of morphological and crystallographic textures in elasticity. In the case of morphological texture, a stronger influence on the crystallographic texture in terms of residual stresses (several tens of MPa difference) was observed.*

**Mots clefs :** diffraction, transition d'échelles, homogénéisation, texture morphologique, contraintes résiduelles.

## 1 Introduction

Depuis longtemps, les contraintes résiduelles ont éveillé l'intérêt des scientifiques car le niveau de contraintes dans un matériau peut diminuer ses capacités d'utilisation ainsi que sa sureté d'emploi. En effet, certains procédés peuvent générer des gradients de contraintes très importants. C'est le cas, entre autres, de la découpe au laser de tôles d'acier, de la rectification et de l'usinage. Cette problématique est très importante car la réponse mécanique d'un matériau ne dépend pas seulement de la sollicitation appliquée mais également de l'état mécanique interne de celui-ci en lien avec la microstructure. Parmi les techniques de détermination des contraintes résiduelles dans les matériaux cristallins [1-2], la diffraction des rayons X ou des neutrons occupe une place toute particulière. Cette technique permet, via le déplacement des raies de diffraction et l'étude de l'élargissement de celles-ci, d'évaluer de façon non destructive et quantitative les contraintes de surface, en reliant les déformations mesurées aux contraintes à l'aide des équations de l'élasticité.

La microstructure conditionne largement les propriétés des matériaux. Cette dernière recouvre un grand nombre de paramètres, entre autres, la répartition des phases en présence, la texture cristallographique et la texture morphologique. Au cours de ces dernières décennies, l'influence de la texture cristallographique dans la détermination des contraintes résiduelles par diffraction des rayons X a été l'objet de nombreux travaux de

recherches [3-4], sans pour autant s'intéresser aux effets de la texture morphologique.

Nous nous proposons, dans ce travail, d'étudier l'influence de la texture morphologique sur la détermination des contraintes résiduelles en diffraction des rayons X et des neutrons.

## 2 Modèle autocohérent d'Eshelby-Kröner

Les matériaux polycristallins métalliques, monophasés ou biphasés, présentent généralement des hétérogénéités se manifestant aux différentes échelles du matériau : grains, phases, polycristal. L'étude de tels matériaux hétérogènes requiert l'élaboration d'approches déductives basées sur un modèle micromécanique de transition d'échelles. Il s'agit ici d'effectuer une transition allant du microscopique au macroscopique, entre les différentes échelles d'appréhension des phénomènes et propriétés, avec une prise en compte de la texture morphologique.

Il existe dans la littérature plusieurs types de modèles de transition d'échelles. Nous avons choisi d'utiliser le modèle autocohérent d'Eshelby-Kröner [5-6] pour sa pertinence dans la description du polycristal et surtout pour sa capacité à prendre en compte la nature, la morphologie et l'orientation de toutes les cristallites constitutifs du polycristal. Dans ce modèle, les cristallites sont supposées noyées dans un Milieu Homogène Equivalent (MHE), ayant les propriétés effectives que l'on cherche à déterminer (FIG. 1).

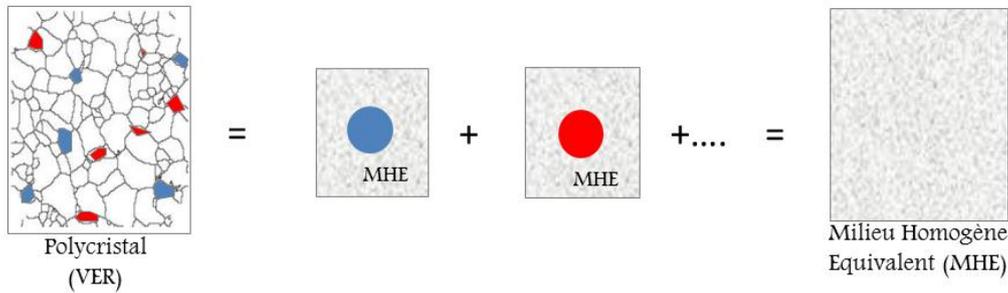


FIG. 1 – Représentation d'un polycristal dans l'approche autocohérente d'Eshelby-Kröner.

Dans cette approche, le tenseur de localisation d'ordre 4 noté  $\mathbf{A}(\Omega)$  s'écrit :

$$\mathbf{A}(\Omega) = \{\mathbf{E} : [\mathbf{c}(\Omega) - \mathbf{C}] + \mathbf{I}\}^{-1} \quad (1)$$

où  $\mathbf{C}$  représente le tenseur des constantes élastiques macroscopiques du polycristal,  $\mathbf{c}(\Omega)$  le tenseur des constantes élastiques d'un monocristal d'orientation cristallographique  $\Omega$  et  $\mathbf{E}$  le tenseur de Morris qui tient compte des interactions locales au niveau des cristallites ; dans le cas d'inclusions ellipsoïdales, il a pour expression [7-8] :

$$E_{ijkl} = \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} \gamma_{ijkl} d\phi \quad (2)$$

avec

$$\gamma_{ijkl} = \mathbf{K}_{ik}^{-1}(\xi) \xi_j \xi_l \quad (3)$$

$$\mathbf{K}_{jp}(\xi) = \mathbf{C}_{ijpl} \xi_i \xi_l \quad (4)$$

$$\xi_1 = \frac{\sin\theta \cos\phi}{a_1}, \quad \xi_2 = \frac{\sin\theta \sin\phi}{a_2}, \quad \xi_3 = \frac{\cos\theta}{a_3} \quad (5)$$

$a_1, a_2, a_3$  sont les longueurs des demi-axes principaux de l'ellipsoïde. Leurs rapports participent à la description de la texture morphologique du matériau considéré.

L'équation de localisation permettant d'assurer un couplage entre les déformations mésoscopiques  $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{II}}(\Omega)$  des cristallites et la déformation macroscopique  $\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{I}}$  du polycristal a pour expression, en utilisant l'équation (1) :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{II}}(\Omega) = \mathbf{A}(\Omega) : \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{I}} = \{\mathbf{E} : [\mathbf{c}(\Omega) - \mathbf{C}] + \mathbf{I}\}^{-1} : \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{I}} \quad (6)$$

### 3 Technique d'analyse des contraintes résiduelles par diffraction

#### 3.1 Géométrie de la diffraction

La diffraction est une technique d'investigation indirecte qui permet de mesurer localement la déformation élastique du matériau, dans la direction normale aux plans diffractants encore appelée direction de mesure. Elle est définie par l'angle de déclinaison  $\psi$  et l'angle d'azimut  $\varphi$  et représente la bissectrice de l'angle formée par le faisceau incident et le faisceau diffracté (position du détecteur) (FIG. 2).

Lorsqu'un polycristal est exposé à un rayonnement de photons X ou de neutrons, seule une partie de l'échantillon reçoit le faisceau incident : c'est le volume irradié. A l'intérieur de ce volume, seules les cristallites dont l'orientation est favorable vont diffracter. Ce sont ces cristallites en position de diffraction qui constituent ce que nous appellerons le volume diffractant.

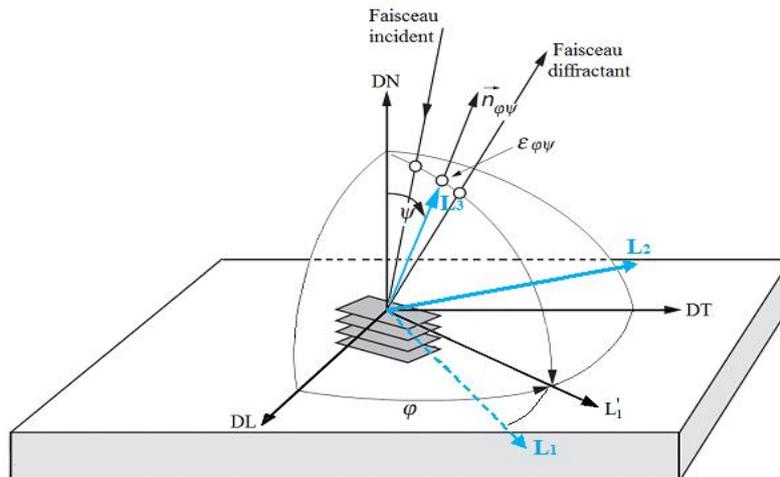


FIG. 2 – Géométrie de la diffraction.

DL, DT et DN désignent respectivement les directions longitudinale, transversale et normale de l'échantillon analysé et définissent ainsi son repère. ( $L_1, L_2, L_3$ ) représente le repère du laboratoire ou repère de mesure.  $L'_1$  est la projection de l'axe  $L_1$  dans le plan de l'échantillon.  $L''_1$  est la projection de l'axe  $L_1$  dans le plan de l'échantillon. Le repère du cristal est défini par le repère lié à son réseau cristallin.

La diffusion cohérente du faisceau incident se traduit par une interférence constructive dont la position angulaire ou angle de diffraction  $\theta(\varphi, \psi, hkl)$  dépend directement de la distance inter-réticulaire  $d^{hkl}$  (loi de Bragg) :

$$\lambda = 2d^{hkl} \sin(\theta(\varphi, \psi, hkl)) \quad (7)$$

où  $\lambda$  est la longueur d'onde du faisceau incident et  $h, k, l$  les indices de Miller du plan diffractant.

La méthode de mesure repose sur l'utilisation du réseau cristallin du matériau comme jauge de déformation. Une perturbation élastique globale va déformer le réseau de manière homogène et provoquer une variation des distances inter-réticulaires. La déformation moyenne du volume diffractant dans la direction de mesure notée est alors :

$$\varepsilon_{\varphi\psi} = \frac{\langle d^{hkl} \rangle_{V_d} - d_0^{hkl}}{d_0^{hkl}} = 1 - \frac{\sin \theta(\varphi, \psi, hkl)}{\sin \theta_0(\varphi, \psi, hkl)} \quad (8)$$

où  $\theta_0(\varphi, \psi, hkl)$  et  $d_0^{hkl}$  représentent respectivement l'angle de diffraction et la distance inter-réticulaire du matériau non contraint,  $\langle \rangle_{V_d}$  correspond à une opération de moyenne sur le volume diffractant  $V_d$ .

#### 3.2 Détermination des contraintes par la méthode des $\sin^2\psi$

Dans le cas d'un polycristal monophasé homogène, macroscopiquement isotrope, en négligeant les incompatibilités de déformation plastique et pour un état triaxial de contrainte  $\sigma^I$ , la déformation moyenne

sur le volume diffractant dans la direction de mesure  $(\varphi, \psi)$  pour une famille de plans  $\{hkl\}$  s'écrit :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\varphi\psi} = & \frac{1}{2}S_2(hkl)(\sigma_{11}^I \cos^2\varphi + \sigma_{12}^I \sin 2\varphi + \sigma_{22}^I \sin^2\varphi - \sigma_{33}^I) \sin^2\psi + \frac{1}{2}S_2(hkl)(\sigma_{13}^I \cos\varphi + \sigma_{23}^I \sin\varphi) \sin 2\psi \\ & + S_1(hkl) \text{Tr}(\sigma^I) + \frac{1}{2}S_2(hkl)\sigma_{33}^I \end{aligned} \quad (9)$$

$\frac{1}{2}S_2(hkl)$  et  $S_1(hkl)$  sont les constantes élastiques radiocristallographiques (CER) de la famille de plans  $\{hkl\}$ .

Cette équation qui peut encore s'écrire sous la forme  $A \sin^2\psi + B \sin 2\psi + C$  est l'équation d'une ellipse dont la pente  $A$  permet de déterminer la contrainte normale dans la direction de mesure et l'ouverture  $B$  la contrainte de cisaillement de surface dans la direction de mesure : c'est la « méthode des  $\sin^2\psi$  ».

Dans le cas d'un état uniaxial de contrainte, l'équation (9) est une droite dont la pente est proportionnelle à  $\frac{1}{2}S_2(hkl)$ .

## 4 Influence de la texture morphologique sur l'analyse des contraintes en diffraction

### 4.1 Texture morphologique

Dans cette première étude, nous avons exploré deux cas particuliers de textures morphologiques : une texture de fibres de même axe et une texture de disques contenus dans le même plan (FIG. 3).

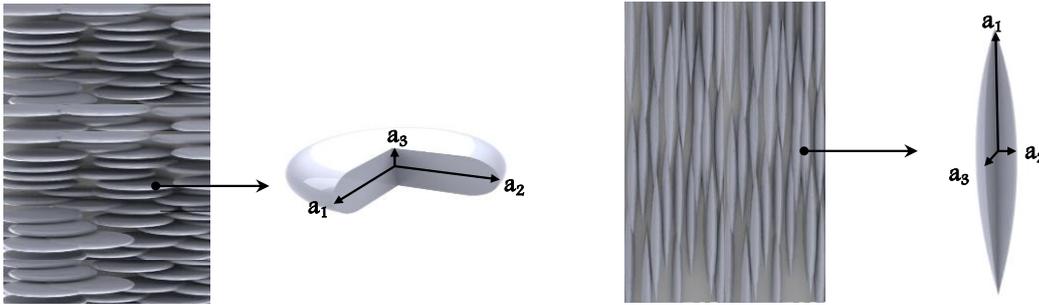


FIG. 3 – Textures morphologiques étudiées.

### 4.2 Application du modèle autocohérent d'Eshelby-Kröner à la diffraction des rayons X

Nous avons vu que la déformation mesurée par diffraction des rayons X est la moyenne des déformations élastiques  $\varepsilon^{II}(\Omega)$  des plans diffractants des cristallites du volume diffractant projetée sur la direction de mesure  $n_{\varphi\psi}$  ( $\sin\varphi\cos\psi$ ,  $\sin\psi\sin\varphi$ ,  $\cos\psi$ ). Cette déformation, notée  $\varepsilon_{\varphi\psi}$ , s'écrit alors :

$$\varepsilon_{\varphi\psi} = \langle \varepsilon^{II}(\varphi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = n_{\varphi\psi} \cdot \langle \varepsilon^{II}(\Omega) \rangle_{V_d} \cdot n_{\varphi\psi}^t \quad (10)$$

où  $n_{\varphi\psi}^t$  est la transposée de  $n_{\varphi\psi}$ . En utilisant le formalisme d'Eshelby-Kröner (équation 6), cette dernière équation est réécrite sous la forme :

$$\varepsilon_{\varphi\psi} = n_{\varphi\psi} \cdot \langle \{ \mathbf{E} : [\mathbf{c}(\Omega) - \mathbf{C}] + \mathbf{I} \}^{-1} \rangle_{V_d} : \boldsymbol{\varepsilon}^I \cdot n_{\varphi\psi} \quad (11)$$

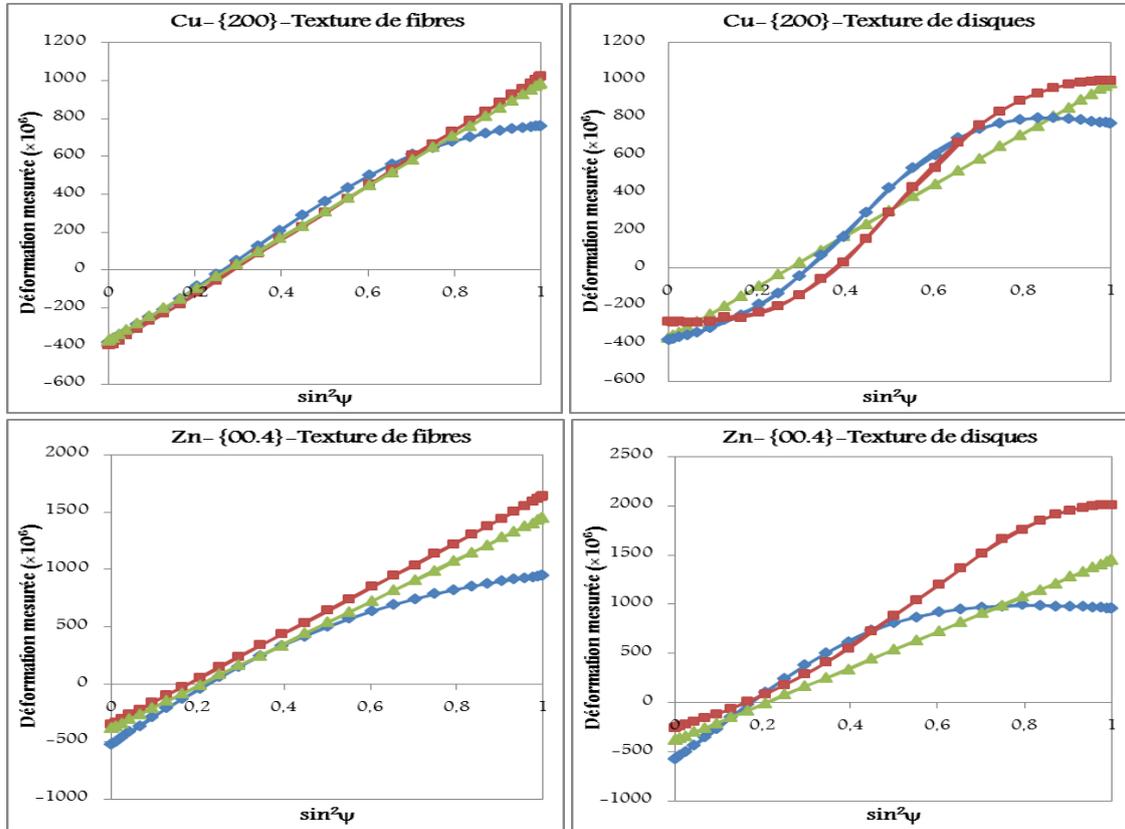
La texture morphologique est ainsi gérée par le tenseur de Morris par les demi-axes principaux  $a_1, a_2, a_3$ .

### 4.3 Conséquences de la texture morphologique sur l'analyse des contraintes en diffraction des rayons X

La prise en compte de la texture morphologique va influencer le comportement macroscopique élastique du polycristal, la loi en  $\sin^2\psi$  en provoquant une modification de  $\varepsilon^{II}$  et donc des déformations mesurées  $\varepsilon_{\varphi\psi}$ . En utilisant l'équation (11), nous avons simulé des essais de traction uniaxiale et de cisaillement puis tracé l'évolution des courbes en  $\sin^2\psi$ , pour différents polycristaux avec les textures morphologiques

définies à la FIG. 3 ; nous avons utilisé une texture cristallographique isotrope. Pour rendre compte de l'influence de la direction de sollicitation, nous avons simulé des essais dans les directions longitudinale et transversale du polycristal avec une contrainte macroscopique imposée de 100 MPa en traction comme en cisaillement. La figure 4 montre les évolutions des courbes  $\sin^2\psi$  obtenues pour les familles de plans  $\{200\}$  du cuivre et  $\{00.4\}$  du zinc.

#### Cas d'un essai de traction



#### Cas d'un essai de cisaillement

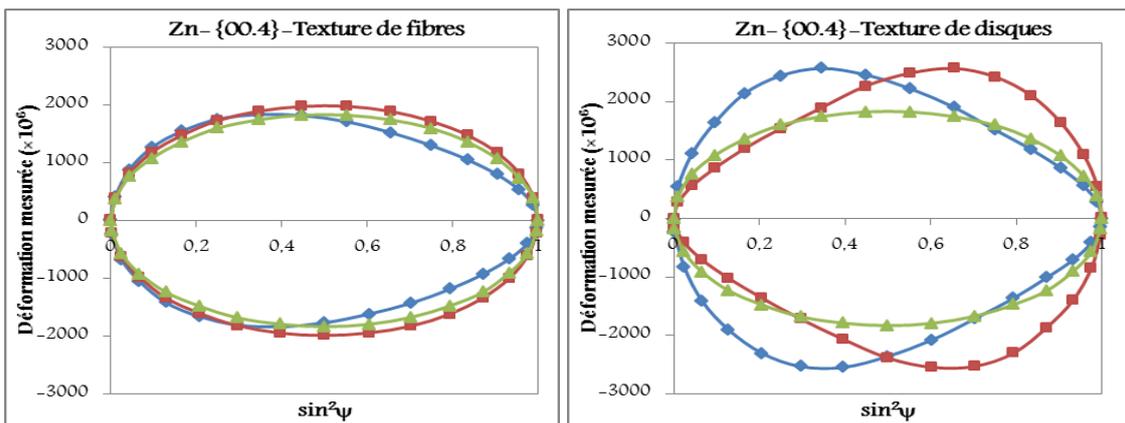


FIG. 4 – Evolution des déformations simulées, mise en évidence des effets de la texture morphologique (fibres et disques) en traction et en cisaillement avec  $\varphi = 0^\circ$  :

- ◆— : cas d'une sollicitation dans la direction longitudinale du polycristal
- : cas d'une sollicitation dans la direction transversale du polycristal
- ▲— : cas d'un polycristal sans texture morphologique (cas des sphères)

Nous remarquons que l'anisotropie introduite par la texture morphologique a fortement modifié les courbes en  $\sin^2\psi$ . L'interprétation de ces dernières en termes de contraintes va donc conduire à des valeurs très éloignées des contraintes réelles dans le matériau. A cause de la non-linéarité de ces courbes, la détermination des contraintes conduira à des valeurs différentes selon la plage d'angles de déclinaison  $\psi$

utilisée dans le contexte expérimental. Nous avons donc considéré pour chaque essai les deux cas suivants correspondants respectivement au cas de la diffraction des RX et des neutrons :  $-57^\circ \leq \psi \leq 60^\circ$  et  $-87^\circ \leq \psi \leq 90^\circ$  avec un pas de  $6^\circ$  et  $\varphi = 0^\circ$ . Les contraintes sont calculées à partir d'une régression elliptique  $A \sin^2 \psi + B \sin 2\psi + C$  (équation 9) des courbes en  $\sin^2 \psi$  en faisant une approximation isotrope. Le tableau 1 donne quelques écarts relatifs entre les contraintes déterminées en diffraction sur des polycristaux texturés morphologiquement et les contraintes réelles dans ces derniers dans le cas d'un essai de traction. Dans le cas d'un cisaillement de surface, des écarts importants sont également observés (jusqu'à 24,6 % pour la famille  $\{00.4\}$  du zinc et 10,0 % pour la famille  $\{200\}$  de l'austénite). Une étude similaire réalisée avec une texture morphologique isotrope (cristallites de forme sphérique) et une texture cristallographique très marquée n'a conduit qu'à seulement 11,0 % d'écart maximal sur les contraintes déterminées. Une prise en compte simultanée d'une texture de fibres ou disques et d'une texture cristallographique marquée donne quasiment les mêmes écarts relatifs que dans le cas de la texture morphologique seule.

Plan analysé	Essai de traction de direction longitudinale				Essai de traction de direction transversale			
	$-57^\circ \leq \psi \leq 60^\circ$		$-87^\circ \leq \psi \leq 90^\circ$		$-57^\circ \leq \psi \leq 60^\circ$		$-87^\circ \leq \psi \leq 90^\circ$	
	fibres	disques	fibres	disques	fibres	disques	fibres	disques
<b>Cuivre</b>								
{400}	5,67	23,06	-11,70	-2,90	5,17	10,68	5,17	9,93
{222}	-6,17	-14,36	10,09	2,15	-2,78	0,15	-2,78	-4,48
{420}	0,52	3,20	-3,12	-0,06	3,12	5,36	3,12	7,11
{331}	-4,47	-13,17	4,31	1,31	-1,81	2,94	-1,81	-2,05
{844}	-3,45	-6,27	2,30	1,13	0,22	-0,08	0,22	2,42
<b>Zinc</b>								
{00.4}	-0,28	25,98	-19,93	-16,66	8,19	36,68	8,19	34,33
{10.4}	-3,45	7,65	-13,02	-10,07	5,07	24,72	5,07	24,77
{11.4}	-4,77	-6,66	-5,29	-5,64	1,63	14,64	1,63	10,45
{20.3}	-3,75	-9,25	0,39	-1,87	-0,92	4,12	-0,92	1,16
{21.3}	-2,70	-8,65	2,62	0,61	-1,27	-2,34	-1,27	-2,73

TAB. 1 – écarts relatifs (en %) sur les contraintes déterminées en DRX, dus à la texture morphologique.

## 5 Conclusion

Nous avons montré dans ce travail que l'analyse des contraintes par diffraction des rayons X et des neutrons dans les matériaux métalliques présentant une texture morphologique peut conduire à des valeurs très éloignées des contraintes réelles dans ceux-ci. Ces écarts dépendent du type de texture morphologique, de l'anisotropie des monocristaux et surtout de la famille de plans analysée. Des effets trois fois plus importants que ceux induits par la seule texture cristallographique ont été observés pour les textures morphologiques étudiées.

## References

- [1] I. Noyan, J. Cohen, Residual Stress Measurement by Diffraction and Interpretation, Springer Verlag, New York, 1987.
- [2] V. Hauk, Structural and Residual Stress Analysis by Nondestructive Methods, Elsevier Science, 1997.
- [3] U. F. Kocks, C. N. Tomé, H.-R. Wenk, Texture and anisotropy: preferred orientations in polycrystals and their effect on materials properties, Cambridge University Press, ISBN 0 521 46516 8, 1998.
- [4] D. Gloaguen, T. Berchi, E. Girard, R. Guillén, Measurement and prediction of residual stresses and crystallographic texture development in rolled Zircaloy-4 plate: X-ray diffraction and the self-consistent model, Acta Materialia, 55, 13, pp 4369-4379, 2007.
- [5] Eshelby J. D., The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion and Related Problems, Proceedings of the Royal Society London, A241, pp 376-396, 1957.
- [6] E. Kröner, Berechnung der elastischen Konstanten des Vielkristalls aus des Konstanten des Einkristalls, Zeitschrift für Physik, 151, pp 504-508, 1958.
- [7] R. Morris, Elastic constants of polycrystals, International Journal of Engineering Science, 8, p 49, 1970.
- [8] U. F. Kocks, C. N. Tomé and H.-R. Wenk, Texture and anisotropy: preferred orientations in polycrystals and their effect on materials properties, Cambridge University Press, ISBN 0 521 46516 8, 1998.