

Etude du gradient de contraintes dans un alliage de zirconium : modèle de transition d'échelles et DRX en faible incidence

V. HOUNKAPTI, D. GLOAGUEN, G. OUM, J. FAJOU, S. FREOUR, 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 :

Deux méthodes complémentaires ont été utilisées pour analyser les gradients de contraintes résiduelles dans des plaques de Zy-4 laminées à froid à différent taux de déformation : la diffraction des rayons X et le modèle autocohérent. Une méthode d'analyse du gradient de contraintes par diffraction des rayons X en faible incidence (méthode « multiréflexion ») a été développée pour quantifier l'état mécanique pour différentes profondeurs en variant l'angle d'incidence. Un couplage entre les résultats expérimentaux et une modélisation autocohérente élastoplastique polycristalline a permis d'étudier l'influence des différentes sources d'hétérogénéités responsables de l'apparition des contraintes internes. Plus spécifiquement, la méthode que nous avons utilisée dans ce travail permet d'évaluer l'amplitude des contraintes du premier et du deuxième ordre en fonction de la profondeur dues aux incompatibilités de déformation plastique en utilisant les informations du modèle d'homogénéisation choisi. Cette confrontation a permis de mettre en évidence le rôle du glissement prismatique dans la plasticité de ce type d'alliage.

Abstract :

Two complementary methods have been used to analyse residual stress gradients in Zy-4 sheet which had undergone cold rolling deformation: X-ray diffraction and self-consistent model. The X-ray diffraction measurement based on the grazing incidence geometry with the multi-reflection method was applied to determine lattice strains in the material. A modified elastoplastic self-consistent model, adapted to large deformation, has been used to simulate the experimental results showing a close agreement with experimental data. The influence and the role of elastoplastic anisotropy have been also studied and explained in this work. The contribution and the magnitude of the first- as well as the second-order residual stresses as a function of the depth have been correctly evaluated using some information from the model. The comparison between X-ray diffraction results and simulations confirms that prismatic slip is the main active deformation mode in this alloy at large strain.

Mots clefs : Diffraction X; Incidence rasante; Gradient de contraintes résiduelles; Modèle autocohérent

1 Introduction

Les alliages de zirconium, de structure cristallographique hexagonale, présentent 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 contraintes internes quand ces matériaux sont soumis à une déformation élastoplastique. Par rapport aux matériaux cubiques, les niveaux de contraintes d'ordre II (mésoscopique) obtenus sont très élevés du fait des incompatibilités de déformation plastique. La déformation mesurée par diffraction X (DRX) peut être fortement influencée par l'anisotropie plastique. Dans le cas de l'élastoplasticité, l'état de contrainte dépend de toute l'histoire de chargement du matériau. En effet, les contraintes résiduelles 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. 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].

Pour étudier ce comportement, des éprouvettes de zircaloy-4 ont été soumises à des essais de laminage, à température ambiante, à divers taux de déformation imposés (30,5 et 47 % de déformation). La DRX a permis de suivre pour ce matériau l'évolution des gradients de contraintes résiduelles d'ordre I (macroscopique) et II (mésoscopique) ainsi que de la texture cristallographique en fonction de la déformation macroscopique appliquée. Ces différentes données obtenues ont permis une caractérisation de l'état mécanique ainsi qu'une meilleure compréhension des mécanismes de déformation de ces alliages de zirconium par le couplage avec les approches de transition d'échelles.

2 Technique expérimentale

2.1 Analyse des contraintes par la diffraction en faible incidence

Différentes méthodes d'analyse des gradients de contraintes par DRX ont été proposées dans la littérature [2]. Dans le cadre de ce travail, la méthode des multiréflexions a été utilisée [3]. Pendant la mesure, l'angle d'incidence α est constant et plusieurs familles de plans $\{hkil\}$ sont analysés par le balayage en 2θ (FIG. 1) On peut alors analyser plusieurs familles de plans avec un angle d'incidence fixe suivant plusieurs directions de mesures définies par l'angle φ . Les angles ψ varient avec les angles de Bragg suivant :

$$\psi(hkil) = \theta(hkil) - \alpha \quad (1)$$

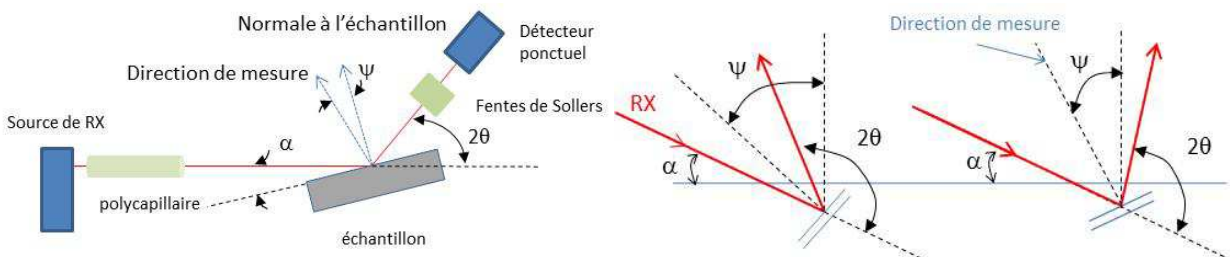


FIG. 1 – Schéma de principe de la méthode des multiréflexions. L'angle d'incidence α est fixé durant la mesure et l'orientation de la direction de mesure est caractérisée par ψ .

Avec cette géométrie, la profondeur de pénétration reste quasiment constante pour les différentes valeurs de 2θ pour un α donné. Donc, en changeant l'angle d'incidence, plusieurs profondeurs de pénétration peuvent être analysées (FIG. 2).

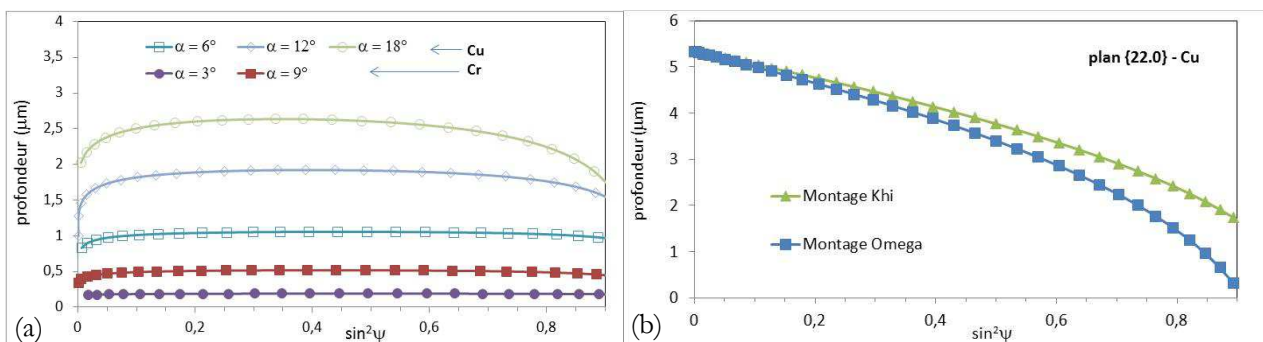


FIG. 2 – (a) Profondeurs de pénétration des X, dans le cas d'un alliage de zirconium, en fonction de $\sin^2\psi$ pour différentes valeurs de α et pour des rayonnements de cuivre et de chrome dans le cas de la méthode des multiréflexions. (b) Profondeurs de pénétration des X, dans le cas d'un alliage de zirconium, en fonction de $\sin^2\psi$ dans le cas de géométries classiques utilisées en analyse de contraintes.

Pour estimer les contraintes résiduelles par cette méthode en faible incidence, il est nécessaire de corriger un certain nombre de facteurs affectant l'intensité des faisceaux diffractés et pouvant modifier la position des pics de diffraction comme les facteurs d'absorption, de Lorentz-polarisation et de réfraction [3]. L'intensité diffractée est affectée par l'absorption des rayons X par le matériau qui dépend de la longueur du parcours des RX dans le matériau. En tenant compte de la géométrie de diffraction, l'intensité diffractée s'exprime alors par :

$$I = cst \frac{1}{1 + \frac{\sin \alpha}{\sin(2\theta - \alpha)}} \quad (2)$$

Le facteur de Lorentz-polarisation (LP) regroupe plusieurs effets dépendant de θ qui ont une influence sur l'intensité intégrée du faisceau de diffraction. Il est donné par :

$$LP = \frac{1 + \cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} \quad (3)$$

Ces deux facteurs vont avoir une influence marquée pour les faibles ($< 40^\circ$) et grandes valeurs de 2θ ($> 140^\circ$) et ces effets doivent être pris en compte dans l'analyse des pics de diffractions.

L'analyse par DRX s'effectuant avec un angle d'incidence faible par rapport à la surface de l'échantillon, la réfraction (déviation du faisceau au passage air-matériau) est un facteur important. Elle provoque un décalage $\Delta 2\theta$ de la position du pic :

$$\Delta 2\theta = \delta [\cot \alpha + \cot(2\theta - \alpha) + 2 \tan \theta] \quad (4)$$

δ dépend des caractéristiques du matériau et de la longueur d'onde, il traduit la déviation de l'onde au passage air-matériau. Cette correction dépend de l'angle d'incidence et pour de petites valeurs, elle peut facilement dépasser $0,01^\circ$.

L'état de contrainte peut être déterminé en utilisant le réseau cristallin comme jauge de la déformation **élastique**. Cette déformation $\langle \varepsilon(\varphi, \psi, hkl) \rangle_{V_d}$ du volume diffractant dans la direction de mesure définie par l'angle de déclinaison ψ et l'angle d'azimut φ , peut être déterminée à partir de la position angulaire $\theta(\varphi, \psi, hkl)$ du pic de diffraction correspondant à un plan cristallographique $\{hkl\}$:

$$\langle \varepsilon(\varphi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = 1 - \frac{\sin \theta(\varphi, \psi, hkl)}{\sin \theta_0(hkl)} \quad (5)$$

Où $\theta_0(hkl)$ est l'angle de diffraction du matériau non contraint. $\langle \rangle_{V_d}$ correspond à une opération de moyenne sur le volume diffractant V_d . La déformation mesurée $\langle \varepsilon(\varphi, \psi, hkl) \rangle_{V_d}$ s'écrit [4] :

$$\langle \varepsilon(\varphi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = F(\varphi, \psi, hkl) \sigma^I + \langle \varepsilon^{IIinc}(\varphi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} \quad (6)$$

Les composantes indépendantes $F(\varphi, \psi, hkl)$ sont les constantes d'élasticité radiocristallographique. La déformation $\langle \varepsilon^{IIinc}(\varphi, \psi, hkl) \rangle_{V_d}$ provient de la moyenne des déformations élastiques provoquées par les incompatibilités de déformation plastiques. Ce formalisme tient compte de l'anisotropie élastique par le 1^{er} terme. Les CER dépendent du plan cristallographique $\{hkl\}$ étudié, des constantes d'élasticité des cristallites, de la morphologie et de la texture. Elles expriment un effet d'anisotropie dans la localisation des contraintes liées à l'anisotropie élastique du cristal. L'anisotropie plastique des cristallites constituant le volume diffractant est prise en compte par le deuxième terme. En effet, il correspond aux compensations résiduelles élastiques dues aux incompatibilités locales de déformation plastique à l'échelle des cristallites. Le second terme de l'équation (6) peut être approximé par :

$$\langle \varepsilon^{IIinc}(\varphi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = q \langle \varepsilon^{IIth}(\varphi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} \quad (7)$$

$\langle \varepsilon^{IIth}(\varphi, \psi, hkl) \rangle_{V_d}$ est calculée à l'aide d'une approche micromécanique. q est un paramètre d'ajustement traduisant le fait que le modèle ne peut reproduire l'intégralité des mécanismes générant les contraintes résiduelles. On peut alors, en utilisant (6) et (7), évaluer les contraintes d'ordre I (macroscopique) et II (mésoscopique). La relation (6) montre que l'interprétation des mesures de déformations en terme de contraintes macroscopiques ($\langle \varepsilon^{IIinc}(\varphi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = 0$) est fautive. On se propose, dans cette étude, de quantifier l'importance et le rôle de ces contraintes d'ordre II sur l'interprétation des résultats de diffraction. L'acquisition des pics de diffraction a été effectuée en utilisant un goniomètre θ - 2θ SEIFERT – Calypso. Les rayonnements utilisés sont la raie K_α du chrome ainsi que la raie K_α du cuivre. Les mesures ont été effectuées

avec un collimateur polycapillaire avant de 2 mm de diamètre. Devant le détecteur ponctuel SDD, des fentes longues de Soller ont été utilisées pour limiter la divergence équatoriale du faisceau.

Pour vérifier le protocole expérimental mis en place ainsi que le réglage du goniomètre (excentrement, divergence, décentrement) dans une configuration en faible incidence (FIG. 1), des analyses de contraintes préalables avec la méthode choisie ont été faites pour des poudres de référence de silicium et de ferrite. La FIG. 3 montre l'évolution du paramètre de maille a_0 de chaque matériau ainsi que la composante σ_{11} du tenseur de contraintes pour la poudre de silicium en fonction de la profondeur de pénétration pour les deux rayonnements utilisés.

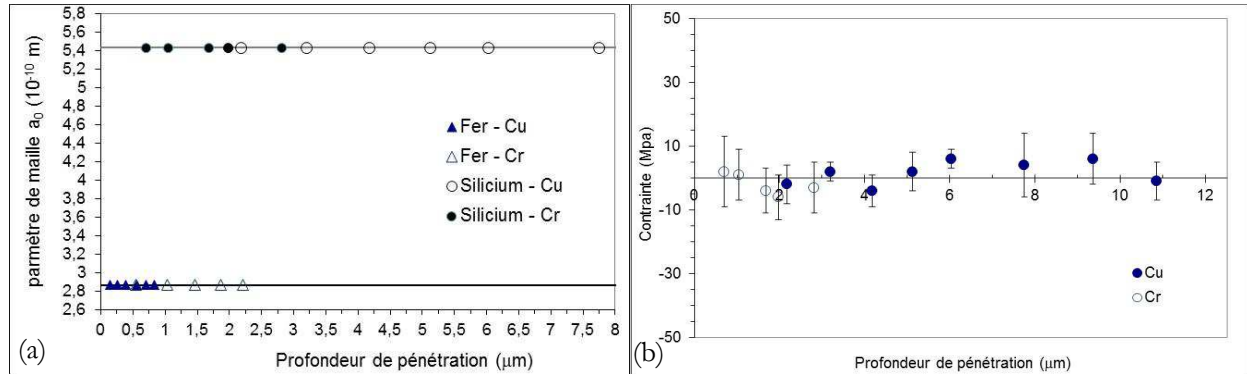


FIG.3 – (a) Evolution du paramètre de maille a_0 en fonction de la profondeur de pénétration pour les poudres de Si et de Fe- α . (b) Evolution de σ_{11} en fonction de la profondeur de pénétration pour la poudre de Si.

La figure montre que les paramètres de maille restent constants pour les différents angles d'incidence (α varie de 2 à 15°) choisis et pour les deux rayonnements : $a_{0\text{Fe}} = 2,8666 \pm 0,0001 \text{ \AA}$ et $a_{0\text{Si}} = 5,4306 \pm 0,0001 \text{ \AA}$. Les valeurs calculées de la composante σ_{11} pour la poudre de Si sont comprises entre - 6 et + 8 MPa et elles restent donc très proches de 0 MPa. Un résultat similaire a été trouvé pour la poudre de ferrite. Ceci montre la justesse de la méthodologie mise en place pour cette étude.

2.2 Détermination de la texture cristallographique

L'évolution de la texture a été analysée en utilisant la raie K_α du cuivre. Les acquisitions ont été effectuées pour des angles de déclinaison variant entre 0 et 65° par pas de 5° et des angles azimutaux variants entre 0 et 355° par pas de 5°. Les figures de pôles (FP) {00.2}, {10.1}, {11.0} et {10.3} ont été utilisées par BEARTEX[®] pour calculer la fonction de distribution des orientations (FDO).

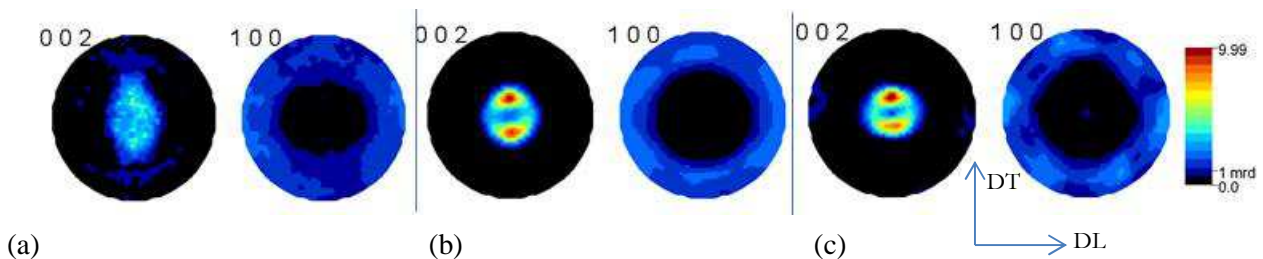


FIG.4 – FP expérimentales {00.2} et {10.0} à (a) 0 %, (b) 30,5 %, (c) 47 % de déformation totale. (DL : direction de laminage et DT : direction transverse).

3 Modélisation

3.1 Approche autocohérente élastoplastique

Une approche autocohérente élastoplastique [4] a été utilisée pour modéliser le comportement de l'agrégat polycristallin. La principale modification concerne la gestion des systèmes activés [5].

D'après le critère de Schmid généralisé, la formulation de l'activité d'un système de glissement est définie par :

$$\tau = R^g : \sigma^{II} = \tau_c^g \text{ et } \dot{\tau}^g = R^g : \dot{\sigma}^{II} = \dot{\tau}_c^g \quad (8)$$

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 :

$$\tau^g < \tau_c^g \Rightarrow \dot{\gamma}^g = 0 \quad (9.a)$$

$$\tau^g = \tau_c^g \text{ et } \dot{\tau}^g < \dot{\tau}_c^g \Rightarrow \dot{\gamma}^g = 0 \quad (9.b)$$

$$\tau^g = \tau_c^g \text{ et } \dot{\tau}^g = \dot{\tau}_c^g \Rightarrow \dot{\gamma}^g > 0 \quad (9.c)$$

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 et al. [5]. Les relations (9a), (9b) and (9c) peuvent alors s'écrire :

$$\dot{\gamma}^g = M^g(\tau^g, \tau_c^g) \dot{\tau}^g \quad (10)$$

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'écroissance durant la plasticité. M^g est donnée par :

$$M^g = \frac{1}{H^{gg}} \left[\frac{1}{2} \left(1 + th \left(k_0 \left(\frac{\tau^g}{\tau_c^g} - 1 \right) \right) \right) \right] \left[\frac{1}{2} (1 + th(\dot{\tau}^g)) \right] \left[\frac{1}{2} (1 + th(\tau^g)) \right] \quad (11)$$

H^{gg} est le paramètre d'autoécrouissage et k_0 , une constante du matériau. En tenant compte de (10), la loi de comportement local à l'échelle du grain est alors :

$$\sigma^{II} = \left[c - \sum_g \sum_h c : R^g (\delta^{gh} + M^g R^g : c : R^h)^{-1} M^h R^h : c \right] : \varepsilon^I = l : \varepsilon^{II} \quad (12)$$

l 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 [4] en tenant compte des relations (10) et (12).

3.2 Paramètres du modèle

Nous avons considéré dans nos calculs le glissement prismatique (pr<a>), le glissement pyramidal (pyr<c+a> et pyr<a>) et le maillage de traction. Les valeurs de scissions critiques et de coefficients d'écroissance utilisés sont reportées dans le Tableau 1 avec $k_0 = 25$. Une loi d'écroissance linéaire est considérée, H^{gr} est égal à H^{gs} pour un mode de déformation donné r : $\dot{\tau}^g = H^g \sum_r \dot{\gamma}^r$. Il reste à déterminer la hiérarchie de ces systèmes en fixant pour chacun d'eux une scission critique de départ ainsi que des coefficients d'écroissance. Pour cela, nous avons donc 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 textures globales *et* de déformations élastiques pour l'ensemble des angles d'incidences choisis. L'ensemble des paramètres sélectionnés doit permettre une description de la réorientation cristallographique. En même temps, les simulations doivent prédire également le comportement observé expérimentalement sur les différents plans en termes de déformations. Le jeu de paramètres répondant au mieux à ces deux conditions a été choisi (Tableau 1). Nous avons considéré deux directions d'analyse φ (0 et 90°), l'angle d'incidence variant entre 3 et 18° pour le rayonnement de Cu et de 3 à 9° pour le Cr. Pour chaque valeur de α , connaissant $\langle \varepsilon^{IIinc}(\varphi, \psi, hkil) \rangle_{V_d}$ (calculées par le modèle élastoplastique à partir des $\varepsilon^{IIc}(\Omega)$ obtenues après la simulation du trajet de chargement), $F(\varphi, \psi, hkil)$ (calculées avec une approche autocohérente élastique) et $\langle \varepsilon(\varphi, \psi, hkil) \rangle_{V_d}$ (mesurées par DRX), q et les composantes de σ^I sont alors déterminés par régression des moindres carrés en supposant un état biaxial de contraintes avec la relation (6).

$\tau^{pr<a>} \text{ (MPa)}$	$\tau^{pyr<a>} \text{ (MPa)}$	$\tau^{pyr<c+a>} \text{ (MPa)}$	$\tau^{maclet} \text{ (MPa)}$
95	237,5	285	190
$H^{pr<a>} \text{ (MPa)}$	$H^{pyr<a>} \text{ (MPa)}$	$H^{pyr<c+a>} \text{ (MPa)}$	$H^{ttw} \text{ (MPa)}$
80	140	120	160

TABLEAU 1 – Paramètres utilisés dans les simulations.

4 Résultats

La FIG. 5 présente les FP {10.0} et {00.2} simulées après le laminage. Un accord qualitatif correct est obtenu entre les textures expérimentale et simulée. La texture prédite est plus marquée. Mais on retrouve les tendances expérimentales observées. Pour le modèle autocohérent, le choix du glissement prismatique comme système de déformation principale a permis de retrouver les courbes $\langle \varepsilon(\varphi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = f(\sin^2 \psi)$ obtenues par DRX pour les différents angles d'incidence du Zy-4, et ceci pour toutes les directions mesurées ($\phi = 0$ et 90°) ainsi que la texture cristallographique induite. Des contraintes d'ordre I de valeur négative assez élevée ($\sigma_{11}^I = -317$ MPa à 47 %) existent, couplées à des contraintes d'ordre II différentes d'un plan à l'autre. Cette méthode a l'avantage de permettre de déterminer les contraintes d'ordre I qui peuvent être très différentes de celles déterminées par les méthodes classiques de DRX, ceci étant donné la forte anisotropie plastique du matériau. Pour illustrer ceci, le Tableau 2 montre les composantes σ_{11}^I et σ_{22}^I calculées en fonction de deux valeurs de α pour un rayonnement de Cu ainsi que les valeurs de contraintes calculées par la méthode classique des $\sin^2 \psi$ qui suppose $\langle \varepsilon^{IIinc}(\varphi, \psi, hkl) \rangle_{V_d} = 0$.

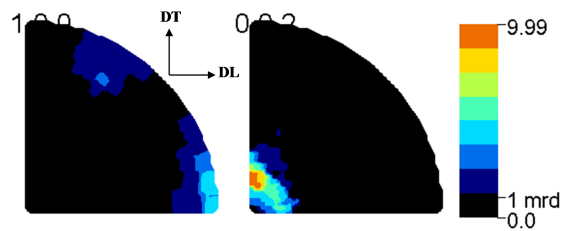


FIG. 5 – FP {10.0} et {00.2} simulées obtenues avec le modèle autocohérent pour l'état final (47 %).

profondeur (μm)	α ($^\circ$)	σ_{11}^I (MPa)	σ_{22}^I (MPa)
0,54	3	-317 \pm 34	-208 \pm 38
2	15	-282 \pm 29	-170 \pm 32
Analyse de contraintes par la méthode des $\sin^2 \psi$		$\{10\bar{1}4\}$	$\{20\bar{2}2\}$
		$\phi=0^\circ$	$\phi=0^\circ$
		-275 \pm 10	-338 \pm 21
		$\{10\bar{1}4\}$	$\{0004\}$
		$\phi=90^\circ$	$\phi=90^\circ$
		-245 \pm 13	-65 \pm 8

TABLEAU 2 – Exemples de résultats obtenus pour les composantes σ_{11}^I et σ_{22}^I en fonction de deux profondeurs d'analyse. Comparaison avec les résultats de la méthode des $\sin^2 \psi$ pour l'état final (47 %).

References

- [1] Dakhlaoui R., Braham C., Baczmanski A., Mater. Sci. Eng. A, 444, 6-17, 2007.
- [2] Skryzypek S.J., Baczmanski A., Ratuszek W., Kusior E., J. Appl. Cryst., 34, 427-435, 2001.
- [3] Wronski S., Thèse de doctorat, ENSAM, Metz, 2007.
- [4] Gloaguen D., Fajoui J., Girard E., Guillén R., J. Appl. Cryst., 43, 890-899, 2010.
- [5] Ben Zineb T., Arbab Chirani S., Berveiller M., 15^{ème} Congrès Français de Mécanique, Nancy, 2001.