Université de Lille

FACULTÉ DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
Département Physique

Physique de la déformation : les polycristaux

Sébastien Merkel
Professeur, département de Physique
Laboratoire UMET (Unité Matériaux et Transformations)
sebastien.merkel@univ-lille.fr

5- Mécanismes élémentaires

Objectifs

Comment se développent les textures dans un polycristal ?

- Plasticité du monocristal :
  - Systèmes de glissement, loi de Schmid, CRSS ;
  - Réorientation pendant la déformation.
- Plasticité dans du polycristal : modèles de Sachs et de Taylor ;
- Problèmes d'inclusion dans une matrice homogène ;
- Modélisation numérique :
  - Modèles en champ moyen ;
  - Éléments finis.

Questions

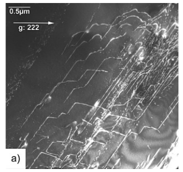
Qu'est-ce qu'un mrd ?
Qu'est qu'une ODF ?
Que vaut une ODF pour un polycristal aléatoire ?
Que vaut une ODF pour un polycristal orienté ?
Que vaut une ODF pour un monocristal ?
Définir l'indice de texture ?
Que vaut l'indice de texture pour un polycristal aléatoire ?
Que vaut l'indice de texture pour un polycristal orienté ?
Que vaut l'indice de texture pour un monocristal ?
Une figure de pôle est-elle une représentation complète de la texture ?
Dans quel cas utilise-t-on une figure de pôle inverse ?
Tracer le secteur cubique utilisé pour représenter une figure de pôle inverse.

5- Mécanismes élémentaires
a- Systèmes de glissement

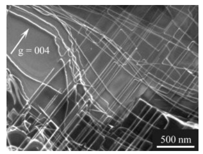
Systèmes de glissement

L'expérience montre que :

- A T ambiante, la majeure partie de la déformation plastique dans les cristaux accommodée par des mouvements de dislocations ;
- Notions importantes :
  - Mouvement d'une dislocation se fait selon un plan bien déterminé ;
  - Mouvement d'une dislocation se fait selon une direction bien déterminée : le vecteur de Burgers ;
- La structure du cristal n'est pas altérée par la déformation plastique ;
- La déformation plastique se fait à volume constant.



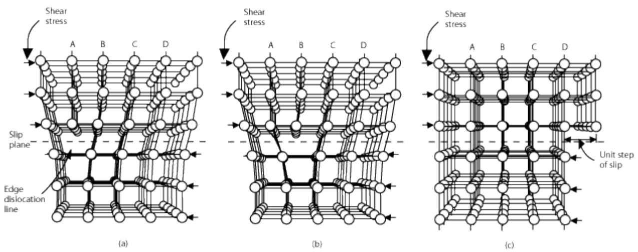
Images MET de dislocations dans une olivine déformée (P. Cordier, H. Couvy)



Effet du glissement

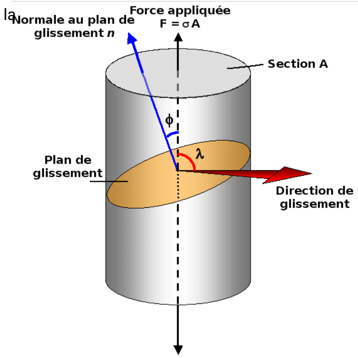
Mouvement de dislocations :

- Une moitié du cristal se déplace relativement à l'autre ;
- Déplacement en *cisaillement*, donnant lieu à une *déformation en cisaillement*.



Contrainte résolue

- Effet de la géométrie sur le glissement ;
- Contrainte résolue : force appliquée dans la direction de glissement, divisée par la surface sur laquelle la force s'applique ;
- Force appliquée dans la direction de glissement :
  $F \cos \lambda$;
- Surface du plan de glissement :
  $A / \cos \phi$;
- Contrainte résolue :
  $\tau = F \cos \lambda / (A / \cos \phi)$;
  $\tau = \sigma \cos \lambda \cos \phi$;
  $\tau = \sigma m$;
- $m = \cos \lambda \cos \phi$ s'appelle le facteur de Schmid



Loi de Schmid

Postulats de Schmid :

- La contrainte de fluage varie d'un échantillon à l'autre en fonction de, entre autres, l'orientation de la maille cristalline relativement à la direction de déformation ;
- La contrainte en cisaillement projetée dans la direction de glissement et dans le plan de glissement initie la déformation.
- Le fluage commence quand cette contrainte en cisaillement atteint une valeur critique, indépendante des autres contraintes appliquées sur le plan de glissement.
- Cette contrainte limite s'appelle « *contrainte limite résolue* », ou encore « *Critical Resolved Shear Stress* » : la *CRSS*.

E. Schmid & W. Boas (1950), *Plasticity of Crystals*, Hughes & Co., London

CRSS : illustration

Système de glissement pour lequel la CRSS est de 1 GPa (τ_c = 1 GPa)

$\lambda = 60°$, $\phi = 45°$

$m = \cos \lambda \cos \phi = \sqrt{2}/4 \approx 0{,}35$

Contrainte résolue :

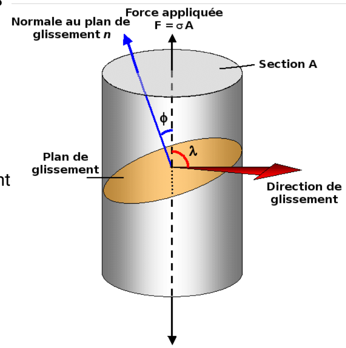
$$\tau = \sigma m$$

Pour avoir glissement, il faut que la contraint résolue atteigne la CRSS :

$$\sigma = \tau_c / m$$

Contrainte à appliquer pour enclencher la déformation plastique :

$$\sigma \approx 1/0{,}35 \approx 2{,}86 \text{ GPa}$$



Rotation induite : traction

La direction de glissement tourne en direction de la direction de traction

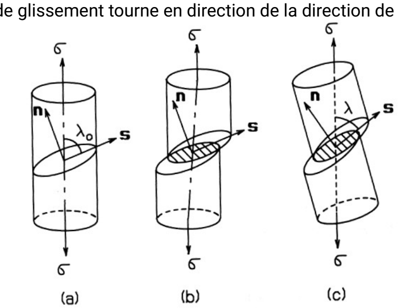


Fig. 10.5 Rotation of crystal lattice in tension

Rotation induite : compression

La normale au plan glissement tourne en direction de la direction de compression

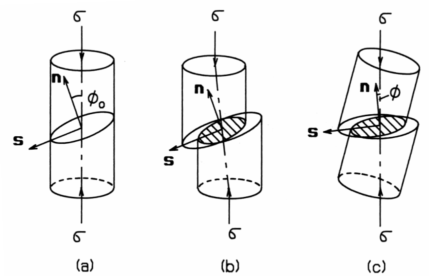
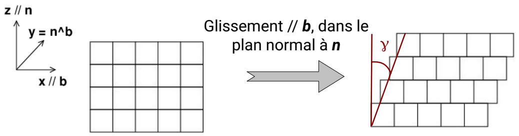


Fig. 10.6 Rotation of crystal lattice in compression

Mise en équation



Déformation

$$\vec{du}(x,y,z) = \begin{cases} \gamma z \\ 0 \\ 0 \end{cases}$$

Gradient de déformation

$$F_{ij} = \frac{\partial du_i}{\partial x_j}$$

$$F = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \gamma \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Analyse cinématique $\quad F = \epsilon + \omega$

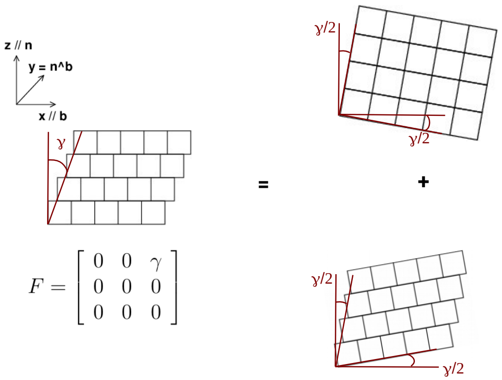
$$\epsilon = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \gamma/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ \gamma/2 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Cisaillement
- trace nulle
- déformation isochore

$$\omega = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \gamma/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -\gamma/2 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Rotation due au glissement

Interprétation géométrique



$$F = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \gamma \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\omega = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \gamma/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ -\gamma/2 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\epsilon = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \gamma/2 \\ 0 & 0 & 0 \\ \gamma/2 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Généralisation

- Dislocation, vecteur de Burgers ***b***, normale au plan de glissement ***n***
- Déformation homogène (mouvement de beaucoup de dislocations uniformément distribuées)
- Déformation macroscopique totale : γ

Déplacement

$$\mathbf{u}(x,y,z) = \gamma\,(\mathbf{r}\cdot\mathbf{n})\,\mathbf{l}$$

$$\mathbf{l} = \mathbf{b}/||\mathbf{b}||$$

$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

Déformation

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2}\gamma\,(n_j l_i + n_i l_j)$$

Rotation

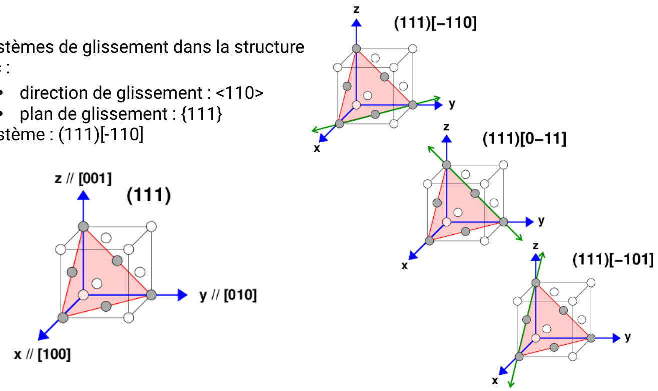
$$\omega_{ij} = \frac{1}{2}\gamma\,(n_j l_i - n_i l_j)$$

5- Mécanismes élémentaires
b- Cas du métal de structure fcc

Systèmes de glissement – fcc

Systèmes de glissement dans la structure fcc :
- direction de glissement : <110>
- plan de glissement : {111}

Système : (111)[-110]



Systèmes de glissement – fcc

- 4 plans {111} : (111), $(\bar{1}11)$, $(1\bar{1}1)$, $(11\bar{1})$;
- Pour chacun : 3 directions <110> ;
- 12 systèmes de glissement pouvant opérer, chacun, dans 2 directions (+ ou -).

Numéro	a1	a2	a3	b1	b2	b3
Plan	(111)	(111)	(111)	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$(\bar{1}\bar{1}1)$
Direction	$[0\bar{1}1]$	$[10\bar{1}]$	$[\bar{1}10]$	[011]	[101]	$[1\bar{1}0]$

Numéro	c1	c2	c3	d1	d2	d3
Plan	$(\bar{1}11)$	$(\bar{1}11)$	$(\bar{1}11)$	$(1\bar{1}1)$	$(1\bar{1}1)$	$(1\bar{1}1)$
Direction	$[0\bar{1}1]$	$[\bar{1}0\bar{1}]$	[110]	[011]	$[10\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}0]$

Exercice 1

Considérer un cristal fcc soumis à une sollicitation selon [001] :

- Calculer les facteurs de Schmid de chacun des 12 systèmes de glissement ;
- Combien de systèmes sont-ils activés simultanément ?

Numéro	a1	a2	a3	b1	b2	b3
Plan	(111)	(111)	(111)	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$(\bar{1}\bar{1}1)$
Direction	$[0\bar{1}1]$	$[10\bar{1}]$	$[\bar{1}10]$	[011]	[101]	$[1\bar{1}0]$

Système a1

- Direction de sollicitation : $\boldsymbol{s}$ = (0;0;1)
- Direction de glissement : $\boldsymbol{l}$ = 1/√2 (0;-1;1)
- Normale au plan de glissement : $\boldsymbol{n}$ = 1/√3 (1;1;1)
- Facteur de Schmid : m = cos λ cos ϕ
- m = $\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{l}\ \boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{n}$
- m = 1/√6

Exercice 1

Considérer un cristal fcc soumis à une sollicitation selon [001] :

- Calculer les facteurs de Schmid de chacun des 12 systèmes de glissement ;
- Combien de systèmes sont-ils activés simultanément ?

Numéro	a1	a2	a3	b1	b2	b3
Plan	(111)	(111)	(111)	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$(\bar{1}\bar{1}1)$
Direction	$[0\bar{1}1]$	$[10\bar{1}]$	$[\bar{1}10]$	[011]	[101]	$[1\bar{1}0]$
F. Schmid	1/√6	-1/√6	0	1/√6	1/√6	0

Numéro	c1	c2	c3	d1	d2	d3
Plan	$(\bar{1}11)$	$(\bar{1}11)$	$(\bar{1}11)$	$(1\bar{1}1)$	$(1\bar{1}1)$	$(1\bar{1}1)$
Direction	$[0\bar{1}1]$	$[\bar{1}0\bar{1}]$	[110]	[011]	$[10\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}0]$
F. Schmid	1/√6	-1/√6	0	1/√6	-1/√6	0

8 systèmes activés

Exercice 2

Considérer un cristal fcc soumis à une sollicitation selon [011] :

- Mêmes questions...

Numéro	a1	a2	a3	b1	b2	b3
Plan	(111)	(111)	(111)	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$(\bar{1}\bar{1}1)$
Direction	$[0\bar{1}1]$	$[10\bar{1}]$	$[\bar{1}10]$	[011]	[101]	$[1\bar{1}0]$

Numéro	c1	c2	c3	d1	d2	d3
Plan	$(\bar{1}11)$	$(\bar{1}11)$	$(\bar{1}11)$	$(1\bar{1}1)$	$(1\bar{1}1)$	$(1\bar{1}1)$
Direction	$[0\bar{1}1]$	$[\bar{1}0\bar{1}]$	[110]	[011]	$[10\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}0]$

Exercice 2

Considérer un cristal fcc soumis à une sollicitation selon [011] :

- Mêmes questions...

Numéro	a1	a2	a3	b1	b2	b3
Plan	(111)	(111)	(111)	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$(\bar{1}\bar{1}1)$
Direction	$[0\bar{1}1]$	$[10\bar{1}]$	$[\bar{1}10]$	[011]	[101]	$[1\bar{1}0]$
F. Schmid	0	-1/√6	1/√6	0	0	0

Numéro	c1	c2	c3	d1	d2	d3
Plan	$(\bar{1}11)$	$(\bar{1}11)$	$(\bar{1}11)$	$(1\bar{1}1)$	$(1\bar{1}1)$	$(1\bar{1}1)$
Direction	$[0\bar{1}1]$	$[\bar{1}0\bar{1}]$	[110]	[011]	$[10\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}0]$
F. Schmid	0	-1/√6	1/√6	0	0	0

4 systèmes activés

Représentation graphique du choix de système de glissement

Système sélectionné dans le système fcc en fonction de la direction de sollicitation.

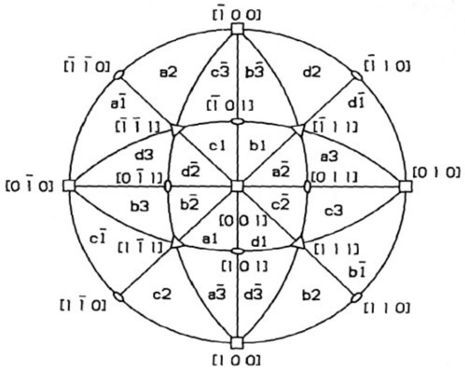


Image A. Rollett, d'après Kahn

Autres systèmes

En plus du système principal, sélectionné car ayant le facteur de Schmid le plus élevé, d'autres peuvent aussi avoir des facteurs de Schmid non nuls et être activés.

Ce sont les systèmes secondaires.

Certains d'entre eux portent des noms particulier.

Par exemple, ceux partageant le même vecteur de Burgers permettent le cross-slip. on les appelle systèmes « cross-slip ».

Le long d'un frontière entre domaines, deux systèmes peuvent être activés, on les appelles des systèmes conjugués. Par exemple, pour une sollicitation entre [100] et [111], les systèmes d$\bar{3}$ et b$\underline{2}$ peuvent être activés. On dit donc, dans ce cas, que les systèmes $(1\bar{1}1)[110]$ et $(\bar{1}\bar{1}1)[101]$ sont des systèmes conjugués.

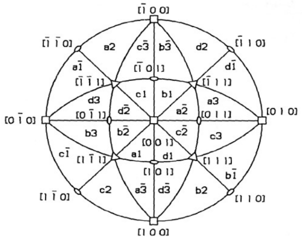
Exercice

On considère un métal de structure fcc sollicité dans la direction [102] :

- Identifier les systèmes de glissement activés ;
- Pour chacun, établir le tenseur des rotations ;
- En supposant la déformation uniformément distribuée dans le cristal, établir le tenseur des rotations total ;
- Décrire l'effet d'une telle sollicitation sur l'orientation du cristal.

a1	a2	a3	b1	b2	b3
(111)	(111)	(111)	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$(\bar{1}\bar{1}1)$	$(\bar{1}\bar{1}1)$
$[0\bar{1}1]$	$[10\bar{1}]$	$[\bar{1}10]$	$[011]$	$[101]$	$[1\bar{1}0]$

c1	c2	c3	d1	d2	d3
$(\bar{1}11)$	$(\bar{1}11)$	$(\bar{1}11)$	$(1\bar{1}1)$	$(1\bar{1}1)$	$(1\bar{1}1)$
$[0\bar{1}1]$	$[\bar{1}0\bar{1}]$	$[110]$	$[011]$	$[10\bar{1}]$	$[\bar{1}\bar{1}0]$



Solution

- Systèmes activés : a1 et d1

$$(111)[0\bar{1}1]$$

$$\mathbf{n} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}1\\1\\1\end{bmatrix} \qquad \mathbf{l} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0\\-1\\1\end{bmatrix}$$

$$\omega_1 = \frac{\gamma}{2\sqrt{6}}\begin{bmatrix}0 & 1 & -1\\-1 & 0 & -2\\1 & 2 & 0\end{bmatrix}$$

$$(1\bar{1}1)[011]$$

$$\mathbf{n} = \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix}1\\-1\\1\end{bmatrix} \qquad \mathbf{l} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0\\1\\1\end{bmatrix}$$

$$\omega_2 = \frac{\gamma}{2\sqrt{6}}\begin{bmatrix}0 & -1 & -1\\1 & 0 & 2\\1 & -2 & 0\end{bmatrix}$$

$$\omega_{tot} = \frac{\gamma}{2\sqrt{6}}\begin{bmatrix}0 & 0 & -1\\0 & 0 & 0\\1 & 0 & 0\end{bmatrix}$$

Signification de ω_{ij}

ω_{ij} = composante anti-symétrique du gradient de déformation

= tenseur de rotation infinitésimale

Déplacement d'un vecteur quelconque

$$du_i = w_{ij}\ u_j$$

$$\begin{bmatrix}du_x\\du_y\\du_z\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 & -\omega_z & +\omega_y\\+\omega_z & 0 & -\omega_x\\-\omega_y & +\omega_x & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u_x\\u_y\\u_z\end{bmatrix}$$

Ce ne sont pas matrices de rotation à proprement parler.

5- Mécanismes élémentaires
c- Critère de compatibilité de von Mises

Critère de compatibilité de von Mises

Critère de compatibilité von Mises:

- Pouvoir déformer un cristal dans toutes les directions ;
- Toutes composantes du tenseur des déformations à accommoder;
- Plasticité = déformation à volume constant ;
- $\varepsilon_{33} + \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} = 0$;
- Restent 5 composantes : $\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \gamma_{12}, \gamma_{13}, \gamma_{23}$;
- Il faut au moins 5 mécanismes de déformation indépendants...

$$\epsilon_{ij}^T = \sum_k \frac{1}{2}\gamma^k \left(n_j^k l_i^k + n_i^k l_j^k\right)$$

Sinon :

- Accommodation par autre mécanisme : joints de grains, montée de dislocations...

Exercice

On considère MgO, un cristal de structure NaCl

- Le système $\{110\}\langle 1\bar{1}0\rangle$ est dominant et dispose de six équivalents de symétrie
  - 1 : $(110)[\bar{1}10]$
  - 2 : $(1\bar{1}0)[110]$
  - 3 : $(011)[0\bar{1}1]$
  - 4 : $(01\bar{1})[011]$
  - 5 : $(101)[\bar{1}01]$
  - 6 : $(10\bar{1})[101]$
- Ces systèmes sont-ils suffisant pour accommoder tout type de déformation ?

Exercice

On considère MgO, un cristal de structure NaCl

- Le système {110}<1$\bar{1}$0> est dominant et dispose de six équivalents de symétrie
- Ces systèmes sont-ils suffisant pour accommoder tout type de déformation ?

$(110)\ [\bar{1}10]$
$$\epsilon = \frac{\gamma}{2}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$(011)\ [0\bar{1}1]$
$$\epsilon = \frac{\gamma}{2}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$(101)\ [\bar{1}01]$
$$\epsilon = \frac{\gamma}{2}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Pas de déformation hors diagonale

$(\bar{1}10)\ [110]$
$$\epsilon = \frac{\gamma}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$(01\bar{1})\ [011]$
$$\epsilon = \frac{\gamma}{2}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$(10\bar{1})\ [101]$
$$\epsilon = \frac{\gamma}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Besoin d'autres systèmes, comme {100}<1$\bar{1}$0>

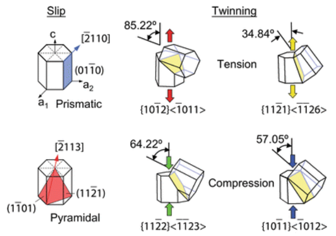
5- Mécanismes élémentaires
c- Autres mécanismes

Autres mécanismes

Le glissement de dislocations n'est pas le seul mécanisme donnant lieu à des orientations préférentielles.

Autre mécanisme important : le maclage.

Macle : deux parties de cristaux, l'une est l'image miroir de l'autre.



Exemple : mécanismes de déformation et d'orientation dans le zirconium.

Padilla et al, *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2007