



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

76090396

UFR MIM

Université de Metz

BIBLIOTHEQUE UFR MIM - METZ	
N° inv.	2001/1195
Cote	S/MZ 01/40
ISGMP	

Contribution micromécanique au comportement multi-échelles d'un matériau composite élastoplastique lamellaire

Application à l'étude des effets du recyclage sur la tréfilabilité d'un acier perlitique industriel

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 26 avril 2001

pour l'obtention du

Doctorat de l'université de Metz

(spécialité mécanique et matériaux)

par

Raphaëlle Krummeich

Composition du jury

<i>Présidente :</i>	Elisabeth Gautier	professeur à l'Ecole des Mines de Nancy
<i>Rapporteurs :</i>	Colette Rey	professeur à l'Institut Galilée, Université Paris XIII
	Frank Montheillet	directeur de recherches CNRS à l'Ecole des Mines de Saint-Etienne
<i>Examineurs :</i>	Marcel Berveiller	directeur de thèse, professeur à l'Ensam de Metz
	André Eberhardt	directeur de thèse, professeur à l'Eni de Metz
	Hafid Sabar	maître de conférence à l'Eni Metz
	Thierry Iung	chef de service à l'IRSID

Contribution micromécanique au comportement multi-échelles d'un matériau composite élastoplastique lamellaire

Application à l'étude des effets du recyclage sur la tréfilabilité d'un acier perlitique industriel

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 26 avril 2001

pour l'obtention du

Doctorat de l'université de Metz

(spécialité mécanique et matériaux)

par

Raphaëlle Krummeich

Composition du jury

<i>Présidente :</i>	Elisabeth Gautier	professeur à l'Ecole des Mines de Nancy
<i>Rapporteurs :</i>	Colette Rey Frank Montheillet	professeur à l'Institut Galilée, Université Paris XIII directeur de recherches CNRS à l'Ecole des Mines de Saint-Etienne
<i>Examineurs :</i>	Marcel Berveiller André Eberhardt Hafid Sabar Thierry Lung	directeur de thèse, professeur à l'Ensam de Metz directeur de thèse, professeur à l'Eni de Metz maître de conférence à l'Eni Metz chef de service à l'IRSID

Mis en page avec la classe thloria.

A Asgard,

Abstract

Keywords: *drawability, similitude principle, pearlitic steelcord, nanomaterials, scale transition, elastoplastic behaviour, homogeneisation, lamellar spacing, non pile-up dislocation mechanism*

Pearlitic steel cords may reach a tensile strength up to 4 GPa and still exhibit some ductility. This unusual property (close to whiskers strength) is related to the process of cold drawing which reduces the size λ of the lamellar substructure, in proportion to the wire diameter (Embury's similitude principle) and induces the formation of crystalline and morphological textures : the single crystal lamellae behave elastoplastically. Usually, the draw hardening is theoretically explained in terms of the combination of a macroscopic Hall-Petch law in $\lambda^{-\frac{1}{2}}$ with the similitude principle applied to wire drawing. In the case studied, the initial size of the substructure (some 10 nm) does not allow a dislocation's pile-up mechanism. However, the experimental draw hardening exhibit a slope ($\ln(R_m) = k\epsilon_{drawing}$) with $k = 1/4$, which is consistent with a macroscopic Hall-Petch law of type $k^{H.P.}\lambda^{-\frac{1}{2}}$. Using a scale transition method based on a non pile-up model for dislocations, the theory proposed here aimed to model the draw hardening of lamellar pearlitic steel. The reduction of the dislocation's mean free path in proportion to the lamellar spacing λ is the main factor studied here, taking no account of the crystalline textures developed during wire drawing. This simple method for calculating the draw hardening curve results in a slope of value 1/4, which is the experimental one's. Thus, a draw hardening slope of 1/4 does not mean a dislocation's pile-up mechanism at the microscale. In other words, **the averaging process used to relate the macroscopic strength to the size and the history evolution of the microstructure needs refinements as proposed in this model.**

Résumé

Mots-clés: *tréfilabilité, acier perlitique, steelcord, nanomatériaux, transition d'échelles, loi de comportement élastoplastique, homogénéisation, principe de similitude, espacement interlamellaire, mécanisme de non-empilement de dislocations*

Les fils d'acier perlitique peuvent atteindre une résistance en traction de l'ordre de 4 GPa et conserver une certaine ductilité. Cette propriété exceptionnelle (proche de la résistance des whiskers) est liée au processus de tréfilage à froid qui réduit la taille λ de la microstructure lamellaire en proportion au diamètre du fil (selon le principe de similitude de J.D. Embury) et induit la formation de textures cristallographique et morphologique : les lamelles monocristallines adoptent un comportement élastoplastique. Généralement, l'écrouissage en tréfilage est obtenu -en théorie- par la combinaison d'une loi de Hall-Petch macroscopique en $\lambda^{-\frac{1}{2}}$ et du principe de similitude appliqué au tréfilage. Dans le cas présenté, la taille initiale de la structure (quelques 10 nm) n'autorise pas le mécanisme d'empilement de dislocations. Cependant, l'écrouissage expérimental en tréfilage ($\ln(R_m) = k\epsilon_t$) est linéaire (dans un large domaine) avec une pente $k = 1/4$, ce qui semble cohérent avec une loi macroscopique de Hall-Petch de la forme $k^{H.P.} \lambda^{-\frac{1}{2}}$. L'approche proposée a pour objectif de modéliser l'écrouissage en tréfilage des aciers perlitiques, à l'aide de méthodes de transitions d'échelles, basées sur un mécanisme de non-empilement de dislocations. La diminution du libre parcours moyen des dislocations en proportion de l'espacement interlamellaire λ est l'effet déterminant étudié ici ; on ne prend pas en compte les textures cristallographiques développées au cours du tréfilage. Cette méthode simple pour calculer la courbe d'écrouissage en tréfilage donne une pente égale à 1/4, ce qui coïncide avec les résultats expérimentaux. En conclusion, une pente d'écrouissage en tréfilage de 1/4 ne signifie pas que le mécanisme déterminant est l'empilement de dislocations à l'échelle la plus fine, même si une loi macroscopique de Hall-Petch est nécessaire pour obtenir la valeur de la pente d'écrouissage, en combinaison avec le principe de similitude. En d'autres termes, **Le processus d'homogénéisation (ou de moyenne) utilisé pour relier la résistance macroscopique à l'évolution de la taille et de l'histoire de la microstructure nécessite plus de finesse comme proposé dans ce modèle.**

Remerciements

Merci à :

Madame Elisabeth Gautier pour avoir accepté de présider mon jury et prodigué des conseils éclairés pour la correction de cet ouvrage ;

Madame Colette Rey et Monsieur Frank Montheillet pour avoir pris le temps de lire ce mémoire et d'accorder votre attention aux travaux qui y sont résumés, ainsi que pour les rapports très encourageants que vous avez produits ;

Monsieur Marcel Berveiller pour ta patience, ta curiosité scientifique, tes idées, ta pédagogie, ton enthousiasme et ton génie ;

Monsieur André Eberhardt pour ton soutien, ta présence, ton pragmatisme scientifique et ta patience à m'aider à rédiger ;

Monsieur Hafid Sabar pour ta rigueur, tes conseils et corrections d'articles, tes interfaces mobiles et ta passion cachée pour Monsieur R. Hill de Cambridge ;

Monsieur Thierry Iung pour ton entêtement à vouloir comprendre ce que je fais et m'obliger à trouver les mots pour le dire ;

Monsieur Michel Guttmann pour m'avoir fait revenir d'Australie avec un sujet de thèse ambitieux et passionnant et un salaire décent, sans parler de tes idées percolatrices d'ensembles discrets et de ton accueil ;

Monsieur Pawel Lipinski pour tes disponibilités à plus d'heures à parler transformation finie et configuration actuelle et aussi ton habilit' si exemplaire ;

Monsieur Karim Inal pour ta confiance, ton soutien et ton témoignage de doctorant devenu MCF ;

Monsieur Etienne Patoor pour ces enseignements si agréables auxquels j'ai pu vaquer pendant deux ans et ton soutien de directeur de labo ;

Monsieur Alain Molinari pour nos discussions de couloir et tes encouragements ;

(aux) techniciens et ingénieurs de l'IRSID et du CREAS sans qui les images de perlite et ses propriétés mécaniques seraient restées un mystère ;

Xavier pour tes images de sonde et ton pragmatisme scientifique ;

Nad' décannée-contractuel pour ces nuits passées entre les cafés, les clopes et l'écran où les chiffres défilaient à l'infini : *recherche debugger désespérément !* ;

Mad' pour ton sourire et ton rire ;

Fred' pour Charlie, les chats et les autres ;

Pat' sans les lunettes et toujours prêt (au fait, quand est-ce qu'on bosse ensemble ?) ;

Isa' pour la photo, le chant et la formulation invariante élégante ;

Anne la Paquin pour ton si beau mariage, ton courage, ton entêtement et ta réussite ;

Den's pour ta mécanique quantique et tes énigmes mathématiques (au fait, je l'ai toujours ton bouquin !)

Amadou pour ton rire et tes bananes douces, abaqus qui d'implicite est devenu explicite en moins de trois ans !

Aimé pour ta gentillesse et douceur, collègue de bureau idéal ;

Fred pour ta détente sèche et ta pratique du ballon rond ;

Jean-Marc pour Latex et autre unisiens utiles ;

Shabnam pour ta confiance, ton soutien et tes conseils ;

Jean-Paul pour les angles d'Euler et la révolution dans la recherche ;

Monsieur Yves Bréchet avec qui j'ai fait mes premières armes ;

Mister Yuri Estrin who gave me this virus, the one that put research in your dreams during these long nights and who is supportive for almost six years now ;

Mister R. Hill for putting some poetry in his excellent papers ;

Planck pour son mur qui nous tire la langue...

mes parents adorables et serviables, ouverts et curieux, chers parents...

Non-merci à :

ceux qui s'arrêtent à la forme avant même de jeter un coup d'oeil sur le fond ;

les physiciens qui n'aiment pas les mécaniciens ;

les mécaniciens qui n'aiment pas les physiciens ;

les chercheurs qui n'aiment pas les industriels ;

les industriels qui n'aiment pas les chercheurs ;

l'étudiant chercheur sans salaire ;

l'ingénieur qui sous-traite au chercheur et au chercheur qui preste des services d'ingénieur ;

la perte du savoir et du savoir-faire de ceux nés lors du babyboom ;

so many papers just for the publisher and researcher accountants!!!

Introduction Générale

Les fils d'acier durs de type 'steelcord' tels que les fils perlitiques ont des propriétés exceptionnelles de résistance à la traction, proche de celle des whiskers. Ces fils sont susceptibles d'atteindre une résistance mécanique de l'ordre du GPa après un certain nombre de réductions au tréfilage. Ils possèdent une ductilité suffisante pour être mis en forme ultérieurement. On les trouve par exemple comme renfort dans la structure d'un pneu.

Les caractéristiques mécaniques de la perlite tréfilée sont à associer à une microstructure évolutive complexe et très fine. En cours de tréfilage, la résolution d'un microscope électronique à transmission est nécessaire pour discerner l'alternance des lamelles de ferrite et de cémentite. Leur espacement (ou espacement interlamellaire) caractérise la description du matériau composite et il évolue avec la déformation de tréfilage de 100 nm à moins de 10 nm. La microstructure est suffisamment fine pour ranger l'acier étudié dans la catégorie des nano-matériaux de structure.

En cours de tréfilage, la réduction de l'espacement interlamellaire (e.i.) est accompagnée de la dissolution partielle de la cémentite. L'évolution de la microstructure a lieu selon un ensemble complexe de mécanismes où sont couplées la déformation élasto-plastique et la transformation de phase. En début de tréfilage, le premier phénomène est déterminant alors qu'en fin de tréfilage, la dissolution de la cémentite provoque une importante fragilisation du fil. Nous nous intéressons ici essentiellement aux modifications des propriétés mécaniques associées aux mécanismes de déformation élasto-plastique.

Le contexte industriel de l'étude est le tréfilage d'un acier perlitique, dont la composition varie avec le taux de recyclage des ferrailles. Les objectifs de ce travail sont :

- d'un point de vue pratique, l'adaptation du processus industriel de transformation de l'acier à l'enrichissement en résiduels (recyclage), et la caractérisation des modifications microstructurales et des propriétés mécaniques,
- plus fondamentalement, la description de l'évolution de la microstructure permettant de prévoir le comportement élasto-plastique du matériau composite.

Nous tenterons de caractériser, dans ce contexte, les effets du cuivre (élément résiduel) sur la microstructure perlitique, la traction et le tréfilage de la perlite.

Il est possible de séparer ces effets en deux catégories : les effets directs du cuivre sur la déformabilité de la perlite (durcissement par solution solide ou précipitation) et les effets indirects liés aux modifications morphologiques du matériau du fait de l'enrichissement en résiduel.

Une telle distinction est arbitraire, et naît des observations métallurgiques sur le durcissement par le cuivre des aciers ferritiques. Toutefois, on peut sans confusion distinguer les effets du cuivre sur le volume massif (bulk) d'une phase, la ferrite ou la cémentite (est-elle enrichie en cuivre ?), et sous quelle forme il se présente (solution solide ou précipité ?). Une estimation des conséquences sur les propriétés macroscopiques est alors liée aux observations fines de la microstructure (en deçà de l'espacement interlamellaire). Ces effets sont alors considérés comme "directs".

Le procédé de transformation de l'acier est thermodynamiquement et cinétiquement contrôlé. Il n'y a nul doute que le cuivre, même en faible quantité affecte la transformation perlitique. Le cuivre est connu pour son caractère trempant et va modifier la température de transformation perlitique. Ce changement de composition de l'acier va donc générer une microstructure différente qu'il est nécessaire de caractériser (forme t'on toujours de la perlite ?). Par exemple, il est notable

que la baisse de la température de transformation de l'acier va, dans certaines conditions, affecter l'espacement interlamellaire moyen (global) de la perlite. A l'échelle du composite lamellaire, les propriétés mécaniques en seront probablement affectées, de façon "indirecte".

La spécificité de la structure lamellaire du composite vient du grand nombre d'interfaces présentes dans le matériau et du rôle que celles-ci adoptent dans les mécanismes inélastiques responsables de l'évolution de la microstructure lors de la mise en forme en tréfilage. Ici aussi il est possible d'émettre des hypothèses sur la localisation et le rôle d'un élément ségrégeant comme le cuivre (théoriquement peu soluble dans la cémentite), en fonction du rôle et de la nature de l'interface entre deux lamelles juste après la transformation perlitique ou après déformation de la perlite.

Du fait de sa complexité, la description de l'évolution de la microstructure du matériau au cours du tréfilage nécessite plusieurs échelles d'observation des phénomènes.

D'un point de vue macroscopique, les grains de perlite s'allongent dans le sens longitudinal du fil et s'"enroulent" autour de l'axe du fil. Dans la section du fil, la microstructure se perturbe et les grains ainsi que les lamelles forment des vagues ou rubans ("wavy microstructure" ou "ribbon-like regions").

A une échelle microscopique, les lamelles de cémentite s'affinent et une part d'entre elles s'aligne avec l'axe du fil.

Enfin, à l'échelle la plus fine, l'évolution de la structure des nombreux défauts devient très complexe; la sous-structure perlitique initiale contient déjà un nombre important de défauts -et interfaces- et subit différents modes de déformation en fonction de l'état de contrainte local.

Toutefois, il est possible de faire des hypothèses sur les mécanismes physiques déterminants de la déformation plastique dans le contexte d'une perlite très fine (nanomatériau) et d'approcher la compréhension du comportement du matériau à l'échelle des dislocations.

Il est fondamental de considérer ici une microstructure perlitique très fine (e.i. initial d'environ 100 nm). En effet, l'hypothèse de base de ce travail est d'attribuer aux interfaces le principal rôle d'obstacle au mouvement des dislocations. On suppose que le volume des lamelles est suffisamment faible pour que les forces motrices nécessaires à la germination et la multiplication des dislocations à l'intérieur d'une lamelle soit sans commune mesure avec celles nécessaires à la création de défauts à l'interface entre la ferrite et la cémentite. Si on estime la contrainte nécessaire à la propagation d'une boucle de dislocation dans une lamelle de 100 nm à 10 nm de largeur, $\sigma = \frac{\mu b}{l}$ atteint des valeurs de l'ordre de $\frac{\mu}{50}$. Pour une lamelle de largeur 1 nm, cette contrainte approche la contrainte théorique $\frac{\mu}{2\pi}$. Il est donc probable que le mécanisme physique déterminant à cette échelle sera lié à la présence de l'interface entre la ferrite et la cémentite, et à sa nature.

L'approche par les champs élastiques locaux des défauts présents à l'interface semble très complexe ici (présence de dislocations, marches etc.). Il est possible par contre de décrire le matériau selon un formalisme micromécanique approprié. En effet, les récents développements de la théorie des champs moyens permettent de considérer et de caractériser l'hétérogénéité de déformation entre les phases séparées par l'interface. Pour cela, on suppose que la densité des dislocations dans le volume de chaque lamelle adjacente est faible en relation avec la densité de défauts à l'interface. On remplace ainsi les discontinuités élastiques locales (défauts) réelles par une interface de nature

connue entre deux champs moyens locaux (celui de la ferrite et celui de la cémentite) ; on prend ainsi en compte l'hétérogénéité de déformation entre la ferrite et la cémentite, au niveau des lamelles. Le principe de modélisation proposé repose alors sur les méthodes de transition d'échelles.

La modélisation est décomposée en plusieurs étapes, en relation avec l'échelle à laquelle les phénomènes inélastiques et les paramètres de la microstructure du composite lamellaire sont déterminants.

La première échelle est celle du mouvement discret des dislocations, dont le libre parcours moyen est déterminé par l'e.i.. Les mécanismes physiques responsables de l'accommodation élasto-plastique du matériau sont la base des hypothèses du modèle. Selon le formalisme micromécanique, il est possible de relier à l'e.i. la force motrice associée au glissement plastique anisotrope dans une phase. On établit ainsi les lois de l'écoulement plastique local, intrinsèques à la morphologie lamellaire des grains mono cristallins (ou lamelles) et à la cristallographie interdépendante des constituants du matériau.

La deuxième échelle est celle des monocristaux, dont le comportement fortement non linéaire est supposé élasto-plastique. Du fait des observations expérimentales après tréfilage, le renfort est supposé présenter une certaine ductilité. Les paramètres du comportement élasto-plastique de la cémentite deviennent 'ajustables' par méthode inverse de transition d'échelles. Cette étape permet alors de caractériser l'anisotropie du glissement plastique dans chaque constituant de la perlite. La formulation choisie à cette échelle est celle des transformations finies.

Une telle description de la perlite prend en compte la cristallographie des phases et l'effet de la forme des cristaux sur le libre parcours moyen des dislocations. Mais elle nécessite une échelle supplémentaire pour produire les effets de la morphologie perlitique et du couplage de la déformation élasto-plastique des deux phases constitutives. Pour procéder à une opération d'homogénéisation appropriée, une description mésoscopique du matériau fait apparaître l'îlot perlitique (ou 'grain' biphasé de perlite) - un ensemble de lamelles alternées parallèles. Certaines hypothèses sur la microstructure perlitique sont alors nécessaires, et on introduit une échelle de description intermédiaire. A ce niveau, la géométrie cristalline du glissement dans chaque phase et la morphologie lamellaire des cristaux sont prises en compte.

L'échelle supérieure est celle d'un volume élémentaire de l'acier perlitique (un nombre statistiquement suffisant d'îlots), soit l'échelle macroscopique, pour laquelle il est possible de caractériser expérimentalement et par simulations le comportement du matériau.

Ce mémoire s'articule en cinq parties.

La première partie a pour but de poser les hypothèses nécessaires à une approche en micromécanique du matériau. Il comprend deux parties : la première s'attache à la description de la microstructure, la seconde caractérise les mécanismes de déformation associés à la mise en forme du composite biphasé lamellaire étudié.

La seconde partie (indépendant) traite le problème du recyclage de l'acier perlitique, qui génère des modifications significatives de la microstructure et des propriétés mécaniques du matériau.

Ces deux parties contiennent les bases physiques (métallurgiques) nécessaires aux hypothèses

effectuées dans les chapitres théoriques (modélisation) suivants.

Dans la troisième partie, on détermine les propriétés spécifiques de l'écoulement plastique dans les constituants de la perlite, en proposant un modèle micromécanique d'expansion d'une boucle de dislocation en relation avec la morphologie lamellaire des grains mono cristallins et les observations métallurgiques.

Pour prévoir le comportement du matériau, il est nécessaire de connaître le comportement de chaque monocristal. La quatrième partie présente un modèle de comportement élasto-plastique du monocristal en transformations finies, appliqué aux deux constituants de la perlite.

Enfin, la cinquième partie présente la technique d'homogénéisation utilisant les opérateurs inter-faciaux, afin d'obtenir le comportement du grain biphasé de perlite ou îlot. Par une opération de moyenne simple (de type Taylor-Lin), il est possible d'obtenir alors la corrélation entre l'expérience et la simulation. La logique de ce travail de modélisation suit les différentes opérations de moyenne effectuées depuis la boucle de dislocation jusqu'à un volume élémentaire représentatif du matériau composite.

Table des matières

Introduction Générale	vii
-----------------------	-----

Présentation générale	1
-----------------------	---

1	
Introduction	3

2	
Formation de la perlite	5

2.1	Transformation perlitique	5
2.2	Microstructure perlitique	7
2.2.1	Définition de l' espacement interlamellaire (e.i.)	7
2.2.2	Définition de l'îlot perlitique	9
2.2.3	Cristallographie des constituants perlitiques	10
2.3	Décorrélation des îlots	10
2.4	Nature de l'interface α/θ	12
2.5	Relations d'orientation ferrite-cémentite perlitique	15
2.6	Effets des éléments d'alliage	16
2.7	Conclusion	17

3	
Mécanismes de déformation/Tréfilabilité	19
3.1 Déformation de la perlite	19
3.1.1 Comportement des dislocations	19
3.1.2 Contraintes résiduelles	20
3.1.3 Conclusion	22
3.2 Structure du glissement dans les constituants de la perlite	22
3.2.1 Ferrite	22
3.2.2 Cémentation	22
3.3 Le tréfilage de la perlite	23
3.3.1 Courbes d'écrouissage en tréfilage	23
3.3.2 Principe de similitude	24
3.3.3 Evolution de la microstructure	25
3.4 Conclusion	26
4	
Effet d'espacement interlamellaire	27
4.1 Effet composite : orientation des colonies	27
4.2 Evolution de l'espacement avec la déformation	30
5	
Modélisation	33
6	
Contraintes internes	35
7	
Conclusion	39

8	
Introduction	47

9	
Formation de la perlite	49

9.1	Composition de l'acier	49
9.2	Etude thermodynamique et cinétique de la transformation	49
9.2.1	Thermodynamique - Simulations	49
9.2.2	Transformation isotherme	51
9.3	Conditions industrielles	52
9.4	Conclusion	54
9.5	Morphologie des constituants	55
9.5.1	Espacement interlamellaire	55
9.5.2	Régularité	56
9.6	Conclusion	57

10	
Déformation de la perlite	61

10.1	Traction des fils non tréfilés	61
10.2	Traction des fils tréfilés/Courbes d'écrouissage	63

11	
Localisation du cuivre dans la perlite	67

11.1	Partition du cuivre dans les constituants	67
11.2	Solution solide	68
11.3	Etats de précipitation	69
11.4	Conclusion	69

12	
Conclusion	75

Notations générales	81
----------------------------	-----------

Notations	83
------------------	-----------

Modélisation des mécanismes élémentaires de déformation	85
--	-----------

13	
Introduction	87

14	
Approche thermodynamique d'une inclusion à frontière mobile	89
14.1 Energie libre d'Helmholtz	90
14.2 Problème de l'inclusion-matrice	90
14.3 Energie complémentaire - Forces motrices	91

15	
Applications	93
15.1 Variables morphologiques κ et ρ	94
15.2 Forces Motrices	97
15.3 Cellules de dislocation	100
15.4 Effet de confinement - Morphologie lamellaire du grain	103
15.5 Conclusion	107

109

Notations	111
------------------	------------

Comportement élastoplastique des constituants de la perlite	113
--	------------

16	
Introduction	115
16.1 Description du Mouvement	116
16.2 Choix du modèle	118

17		
Cinématique		121
18		
Variable associée à $\mathbf{d}$		123
19		
Comportement plastique du monocristal		125
19.1	Définition du taux de déformation plastique $\mathbf{d}^p$	125
19.2	Détermination des tenseurs $\boldsymbol{\mu}^h$ et $\boldsymbol{\lambda}^h$	125
19.3	Règle de normalité	127
20		
Loi d'écrouissage du monocristal		129
20.1	Loi de Schmid-Loi seuil	129
20.2	Loi physique d'écrouissage	129
21		
Construction des modules tangents du monocristal		131
22		
Résultats		133
22.1	Introduction	133
22.2	Données du problème	133
22.2.1	Géométrie du glissement	133
22.2.2	Matrices des modules d'écrouissage	135
22.2.3	Paramètres physiques	136
23		
Conclusion		139
		141
Notations		143

Comportement de l'îlot perlitique	145
--	------------

24	
Introduction	147
25	
Position du problème-Equations constitutives	151
25.1 Description du V.E.R.	151
25.2 Equations constitutives	152
26	
Opérateurs Interfaciaux	153
26.1 Relations de localisation	153
26.2 Estimations de Hashin-Shtrikman - Extension au problème élastoplastique . .	154
27	
Comportement du milieu homogène équivalent	157
27.1 Opération de moyenne	157
27.2 Module tangent équivalent	157
27.3 Choix du milieu de référence	158
27.4 Mouvement de l'interface	159
28	
L'îlot perlitique : simulations	161
28.1 Cisaillement	161
28.2 Traction	163
28.3 Conculsion	165
29	
Application au cas de l'acier perlitique	167
29.1 Comportement global	167
29.1.1 Traction	169
29.1.2 Cisaillement	169
29.2 Comportement local	170

29.2.1 Traction	170
29.2.2 Cisaillement	172
29.3 Hétérogénéités de déformation	173
29.3.1 Traction	173
29.3.2 Cisaillement	173
29.3.3 Conclusion	173
29.4 Contraintes Internes	175
29.4.1 Traction	175
29.4.2 Cisaillement	175
29.5 Traction des fils industriels	176
29.6 Courbe d'écrouissage des fils perlitiques	177

30	
Conclusion	181

Conclusion Générale	183
----------------------------	------------

Bibliographie	189
----------------------	------------

Annexes	197
----------------	------------

A	
Formulation invariante de l'énergie complémentaire	199

B	
Evolution de la structure cristalline	201

Table des matières

C	
Activité des systèmes de glissement	205
D	
Pertinence de l'extension au problème élastoplastique de la borne de Hashin-Strikman	211

Présentation générale

Introduction

Le cadre de ce travail s'inscrit dans le projet quinquennal *Cycle du Fer* associant la Région Lorraine, Usinor et différents partenaires régionaux. Ce projet a pour but d'adapter les produits et procédés de la sidérurgie à la filière ferrailles. Le contexte européen du recyclage des aciers et le caractère bon marché de la matière première ferrailles ont pour conséquence une redéfinition des tolérances de composition des aciers. Il est nécessaire de repréciser les paramètres du procédé et d'étudier les effets de l'enrichissement en éléments résiduels, tel le cuivre, sur la déformabilité du nouveau matériau.

La composition de l'acier étudié est une nuance perlitique industrielle, plus ou moins enrichie en cuivre (nuance initiale + de 0% à 0.8%*Cu* en poids). Le matériau est constitué de deux phases, la ferrite et la cémentite, intimement imbriquées dans une microstructure lamellaire fine et complexe (l'espacement entre lamelles est d'environ 100nm).

Les fils d'acier tréfilés ont de nombreuses applications industrielles, sous forme de fils durs, plus ou moins fins et résistants (jusqu'à 4 GPa) : câbles de renfort dans les pneumatiques, câbles, bras d'essuie-glace, fils à vigne, agrafes, ressorts ou autre matériau de structure dans les domaines tels le bâtiment, l'outillage...

L'acier perlitique possède les caractéristiques mécaniques (traction, torsion...) issues de la prédéformation en tréfilage. Cette étape de mise en forme induit une modification importante et complexe de la microstructure, déterminante dans l'amélioration des propriétés mécaniques requises pour un fil tréfilé (toronnage, laminage ou autre mise en forme...).

Le principal paramètre morphologique de la perlite est l'espacement interlamellaire (e.i.). A l'état brut de laminage (perlite patentée), l'e.i. est essentiellement fonction de la composition de l'acier et du processus de refroidissement lors du laminage du bloom au train à fil. Pour obtenir un acier entièrement perlitique, il est nécessaire de bien contrôler les paramètres composition - vitesse de refroidissement : si le processus n'est pas précisément adapté, le risque est la dégénérescence de la perlite ou la formation de constituants mineurs tels les phases proeutectoïdes ou la formation de bainite ou de martensite, dont la fragilité empêche toute mise en forme ultérieure (toronnage par exemple).

De nombreux mécanismes de déformation sont susceptibles d'intervenir lors de la mise en forme ou lors d'un essai mécanique simple de l'acier perlitique. Il n'est pas possible ici d'effectuer une revue complète des modes de déformation de la perlite brute de laminage ou tréfilée. Nous nous attacherons toutefois de mettre en évidence les caractéristiques principales des divers mécanismes de déformation, en insistant sur l'influence de la finesse morphologique du matériau composite, ainsi que la cristallographie des constituants ferrite et cémentite.

Formation de la perlite

2.1 Transformation perlitique

La transformation perlitique apparaît pour des conditions de température T (voir figure 2.1) relativement proche de la température eutectoïde à l'équilibre thermodynamique $Ae1$ (par rapport à la bainite par exemple) et selon un mécanisme diffusif, précédant la bainite et la martensite qui se forment à plus basse température.

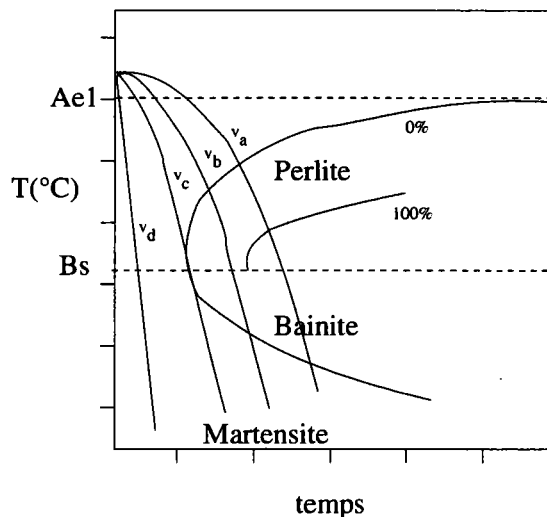


FIG. 2.1 – Diagramme TRC (Transformation en Refroidissement Continu) schématisant le domaine perlitique pour un acier eutectoïde. $Ae1$ est la température du palier eutectoïde du diagramme d'équilibre (figure 2.3), et Bs est la température de transition perlite-bainite. En refroidissement continu lorsque la vitesse de refroidissement augmente ($v_a \rightarrow v_d$), le trajet de transformation est décalé vers la gauche : pour $v < v_a$, la transformation est perlitique, à v_b , on forme aussi de la bainite et à v_d le matériau devient entièrement martensitique. À v_c la transformation est essentiellement perlitique, et on forme la perlite la plus fine pour la composition donnée.

Il existe un large domaine de températures et de compositions pour lesquelles il est possible d'obtenir une structure perlitique lamellaire de l'acier. Le phénomène déterminant dans la transformation perlitique est la diffusion du carbone en tête de front, dans l'austénite parente. Dans le cas d'une transformation isotherme (voir figure 2.1), la composition et la température

choisies déterminent l'espacement interlamellaire. La longueur de diffusion du carbone au front de croissance décroît avec la température et une perlite obtenue à 600° possède un espacement interlamellaire inférieur à une perlite transformée sur une isotherme à 700° par exemple.

Le processus employé pour transformer l'acier brut en fil perlitique est le laminage sur train à fil d'un acier austénisé, en refroidissement continu. Il est donc nécessaire de bien comprendre les conditions de transformation pour obtenir la microstructure désirée.

Pour éviter la formation de constituants mineurs¹ de type bainite supérieure, voire martensite (voir figure 2.1) ainsi que la formation de phases proeutectoïdes (voir figure 2.2 ou 2.3) susceptibles de nuire aux propriétés du matériau, il est nécessaire d'approcher le plus possible la courbe de transformation du nez du domaine perlitique (voir figure 2.1).

Les forces motrices de la croissance perlitique sont directement fonction de la 'sursaturation' ΔT^2 au début de la transformation, et au cours de la transformation. Lorsque la vitesse de refroidissement de l'acier au train à fil augmente, la température de transformation diminue, et la sursaturation augmente, ce qui a pour effet d'affiner la microstructure.

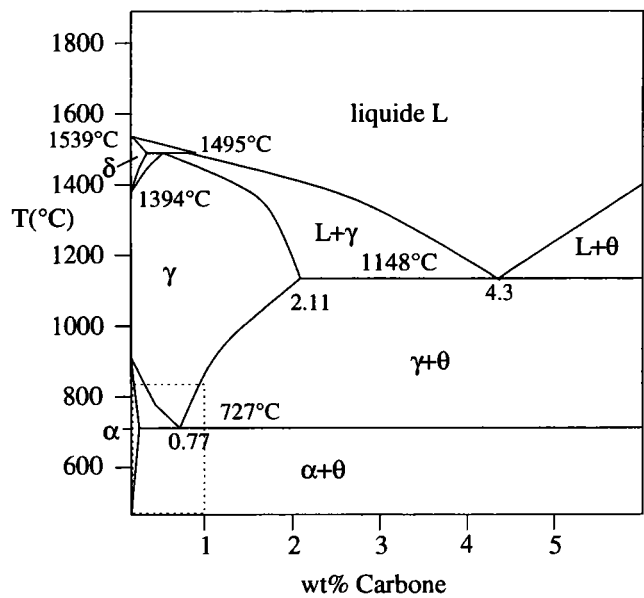


FIG. 2.2 – Le diagramme de phase fer-cémentite. La cémentite est notée θ [7].

La réaction perlitique, est un processus diffusif induisant la formation simultanée des deux constituants. Le diagramme de phase fer-cémentite ($Fe - Fe_3C$) est représenté sur la figure 2.3. Pour obtenir un acier perlitique, sans phase proeutectoïde et ceci pour une gamme industrielle de composition de l'acier (présence de nombreux éléments d'alliage), il est nécessaire de déterminer les paramètres du refroidissement de l'acier. Dans le cas d'un alliage industriel, l'austénitisation à une température légèrement supérieure à $Ae1 = 727^\circ C$ et une vitesse de refroidissement proche de v_c (voir figure 2.1) transforment l'austénite en perlite fine.

¹la température peut être hétérogène dans le matériau et atteindre un seuil critique, localement, donnant lieu à la formation des constituants susceptibles de nuire aux propriétés mécaniques du matériau.

²écart entre la température de transformation réelle et la température eutectoïde $Ae1$ du diagramme d'équilibre

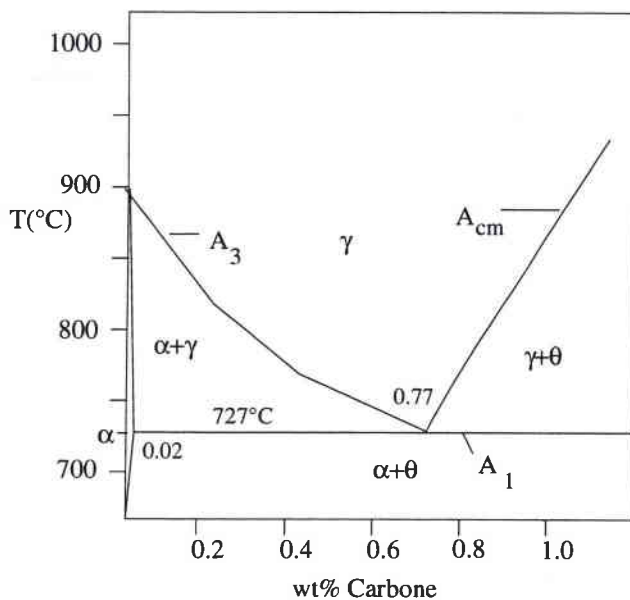


FIG. 2.3 – Diagramme (partiel) de phase Fe–Fe₃C [38]. La température eutectoïde à l'équilibre est notée A₁, la température de transition γ + α ↔ γ est notée A₃ et celle correspondant à l'équilibre γ + θ ↔ γ est notée A_{cm}.

2.2 Microstructure perlitique

La microstructure perlitique est complexe (voir la photographie 2.4). L'objectif de cette partie est de tirer de cette complexité les quelques paramètres morphologiques déterminants pour la déformation de la perlite, donnant ainsi une description simplifiée de la microstructure.

2.2.1 Définition de l'espacement interlamellaire (e.i.)

L'espacement interlamellaire (e.i.) λ_p est défini comme la distance séparant deux lamelles d'une même phase constitutive de la perlite (voir figure 2.5). A une échelle intermédiaire (de l'ordre du micromètre), la structure perlitique est périodique, de période λ_p .

L'e.i. est fonction de la vitesse de refroidissement (v_c) et de la composition de l'acier, lors de la transformation perlitique.

Les fluctuations locales de température et de composition peuvent générer une large distribution d'e.i. dans un même échantillon de perlite (ou dans une même colonie) [101]. L'espacement interlamellaire de la perlite est alors une moyenne sur la distribution réelle des espacements interlamellaires [101].

On différencie l' e.i. vrai λ_p (distance minimale moyenne entre les plans des lamelles), de l'e.i. apparent λ_a (voir figure 2.5), qui est le résultat de l'intersection des lamelles avec le plan d'observation de l'échantillon. Localement, les deux mesures sont liées selon la relation :

$$\lambda_a = \frac{\lambda_p}{\sin(\theta)}$$

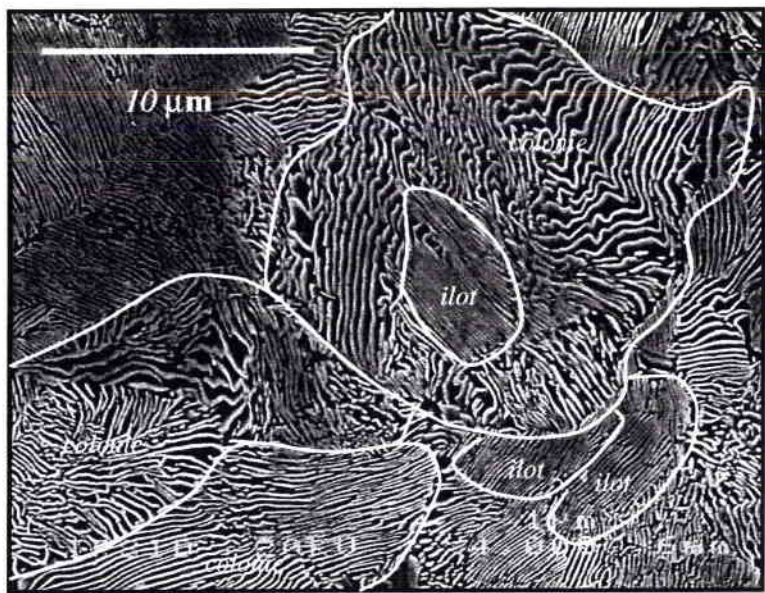


FIG. 2.4 – Exemple de morphologie perlitique de l'acier étudié (nuance sans cuivre) : photographie MEB acquise à l'IRSID sur Jéol. On distingue des ensembles de lamelles alternées parallèles (colonie ou îlot), dont les courbures mènent à une morphologie plus complexe à caractériser.

En moyenne, l'espacement interlamellaire apparent λ_a est lié à l'espacement interlamellaire vrai (moyen) λ_p par la relation [102] :

$$\lambda_p = \frac{\pi}{4} \lambda_a$$

Lors d'un tréfilage intense, l'e.i. peut être réduit d'une centaine de nanomètres à moins de 10nm, faisant de la perlite tréfilée un nanomatériau. On comprend qu'à cette échelle l'e.i. est déterminant dans les mécanismes de déformation susceptibles d'avoir lieu.

Remarque
On caractérise en général l'e.i. d'une perlite par son e.i. apparent (valeur moyenne). La plupart des déterminations de l'e.i. apparent sont réalisées à l'aide de diverses techniques d'analyse d'images, acquises

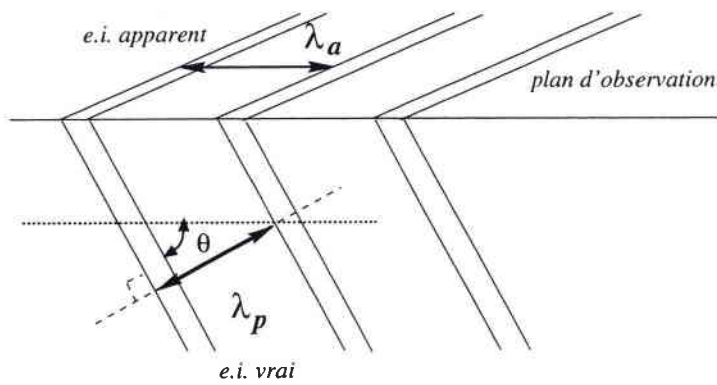


FIG. 2.5 – Représentation schématique des espacements interlamellaire vrai λ_p et apparent λ_a de la microstructure perlitique.

en microscopie électronique à balayage en électrons secondaires sur des sections polies de l'acier attaquées au réactif métallographique Nital ou Picral [67].

2.2.2 Définition de l'îlot perlitique

La microstructure consiste en un nombre de colonies de perlite approximativement lamellaire. Nous verrons dans la suite que les colonies ont probablement germé sur les joints de grains austénitiques. Si on reprend la définition de Pellissier & al [101], la colonie de perlite est constituée de lamelles alternées parallèles de cémentite et de ferrite ; l'espacement interlamellaire est constant dans chaque colonie.

Cette définition ne prend pas en compte les diverses orientations du plan des lamelles qu'on observe dans une même région de perlite (voir figure 2.6), c'est à dire les multiples courbures des lamelles dans une même matrice de ferrite (une seule orientation cristallographique).

Nous adopterons alors comme définition de la colonie perlitique, celle de Hültgren et Ohlin

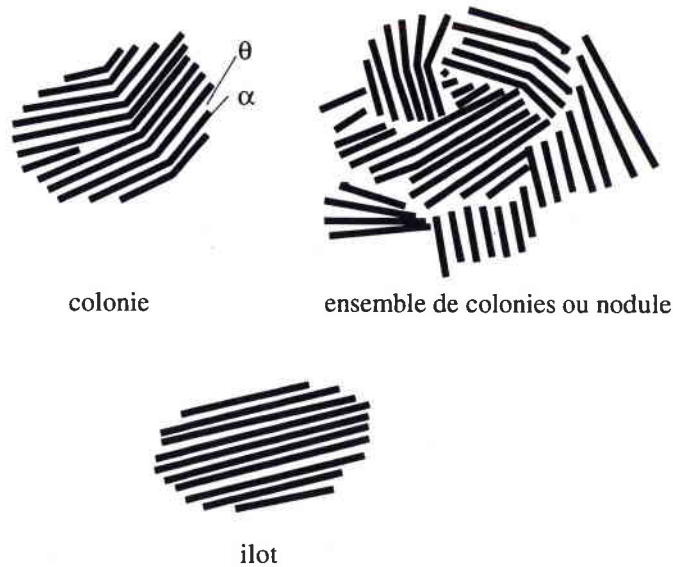


FIG. 2.6 – Représentation schématique des différentes unités structurales de la perlite. La colonie perlitique possède une unique orientation cristallographique de la ferrite, l'îlot possède une unique orientation cristallographique des phases et une unique orientation des lamelles. La phase sombre est la ferrite, composée essentiellement d'atomes de fer, la phase claire est la cémentite, composée de fer et de carbone.

[8] : une colonie perlitique est définie si au moins l'un de ses constituants possède une orientation cristallographique unique. L'orientation cristallographique de la ferrite est le facteur déterminant de la colonie. Le plan des lamelles (plan d'habitat apparent) peut adopter plusieurs orientations dans une même colonie, du fait du mode de croissance de la perlite dans l'austénite.

Il est nécessaire de préciser alors une unité supplémentaire de la microstructure, qui sera utilisée dans cette étude. On supposera que la perlite peut être assimilée à un ensemble d'îlots, dans lesquels l'orientation cristallographique et l'orientation morphologique (plan des lamelles) sont uniques. Cette hypothèse sous-tend qu'il n'existe pas de corrélations d'ordre morphologique entre îlots perlitiques. Un îlot est une colonie au sens de Pellissier & al [101]. Dans la suite, le

terme d'îlot est adopté pour décrire l'unité microstructurale biphasée la plus petite³.

2.2.3 Cristallographie des constituants perlitiques

- La cristallographie des constituants de la perlite est représentée sur la figure 2.7 :
- celle de la matrice ductile -notée αFe ou α - est cubique centrée,
 - et celle du renfort -noté Fe_3C ou θ - est orthorhombique.

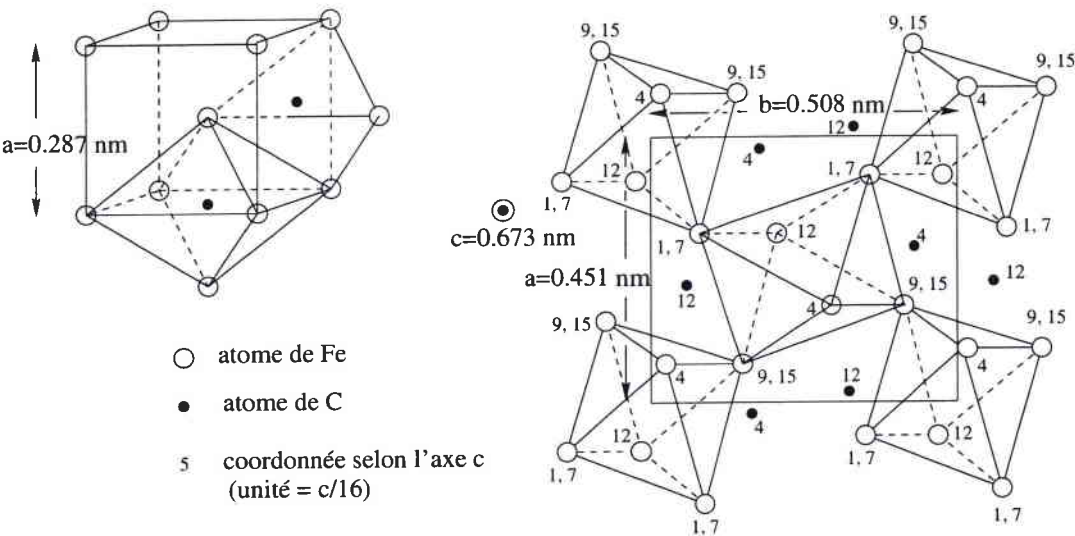


FIG. 2.7 – Structure cristalline des phases produites : la cémentite Fe_3C ou θ (à droite) et la ferrite αFe ou α (à gauche).

Le carbone a une solubilité très faible dans la ferrite ($\%_w C^\alpha = 0.02\%$ à la température eutectoïde), localisé sur les sites octaédriques et tétraédriques. La phase riche en carbone ($\%_w C^\theta = 6.67$) est métastable.

On peut considérer la structure cristalline de la cémentite comme une chaîne d'octaèdres formés d'atomes de fer (similaires en taille et en forme à ceux de la ferrite), s'alignant parallèlement à l'axe c , et situés sur les quatre sommets et au centre de la maille élémentaire (voir figure 2.7).

La différence entre les deux structures est que les octaèdres de la ferrite partagent des côtés, alors que ceux de la cémentite ne se touchent qu'à leurs sommets [9].

Certaines études tendent à montrer que les lamelles cémentite présentent des fautes d'empilement [11]. De même, on est en droit d'émettre certaines réserves sur la continuité cristallographique de lamelles de ferrite, qui peuvent présenter de légères désorientations par blocs dans une même lamelle[11].

2.3 Décorrélation des îlots

L'objectif de ce paragraphe est de justifier l'hypothèse selon laquelle les îlots qui composent la perlite sont décorrélés, c'est à dire qu'il n'existe pas de relation d'orientation entre deux îlots dans la microstructure perlitique. Nous verrons que cette hypothèse permet de suivre la démarche

³Le terme de nodule est utilisé pour caractériser un ensemble de colonies qui a germé dans l'austénite

de modélisation proposée dans les chapitres suivants.

Nous rappelons ici que le phénomène déterminant dans la transformation perlitique est la diffusion du carbone à l'interface de croissance dans l'austénite.

Carpenter et Robertson [12] observent que *(dans) chaque grain d'austénite croissent des colonies dont les désorientations relatives ne suggèrent aucun lien avec les plans cristallographiques de l'austénite*. Smith [45] et Hillert [43] notent que dans le processus de transformation, la diffusion volumique du carbone dans l'austénite est insuffisante à expliquer la valeur élevée de la vitesse de croissance des nodules⁴ de perlite : l'interface de croissance est alors probablement incohérente. On peut supposer que la germination hétérogène de la perlite a lieu sur des plans denses (ou des défauts) de l'austénite (grain γ_1) à l'interface entre deux grains de phase parente ($\gamma_1 \parallel \gamma_2$), et la croissance des colonies a lieu dans le grain voisin (γ_2). En effet, Dippenaar et Honeycombe [62] n'observent pas de relation d'orientation -de faible indice- reproductible entre le grain d'austénite dans lequel la croissance a lieu et les phases de la perlite. Les orientations cristallines de grains voisins d'austénite ne sont généralement pas corrélés [43]. Donc, deux colonies d'un même grain (γ_2) n'ont généralement pas de relation d'orientation entre elles. A fortiori, deux colonies de grains voisins n'ont pas de relation d'orientation reproductible.

L'interface de croissance a été imagée (METHR) et Zhou & al [37] montrent qu'elle est semi-cohérente : l'hypothèse d'une interface incohérente de Smith & al [43] n'est pas nécessaire. En effet, les relations d'orientation ferrite/ austénite ou cémentite/ austénite ne sont pas déterminantes dans la germination de la perlite [37, 50] : en général, le plan cristallographique sur lequel germe la perlite correspond à l'un des plans denses de l'une des trois phases. Cet argument permet d'émettre l'hypothèse qu'il n'existe pas de relation d'orientation en général entre deux colonies. Les colonies de perlite sont donc décorréliées dans le sens qu'elles ne sont pas liées par une relation d'orientation connue.

Remarque

L'espace interlamellaire n'est pas conditionné par l'austénite : en effet, il est lié à la vitesse du front perlitique et est fonction de l'énergie d'interface α/θ ⁵ [40, 59]. Les caractéristiques de l'austénite parente ont des conséquences à une autre échelle. La morphologie nodulaire (diamètre du nodule n_d) de la perlite est directement liée à la taille de grain austénitique d_γ , selon une relation de type $n_d \propto \log d_\gamma$ [44] pour une température de transformation perlitique T_p donnée. La température d'austénitisation ou la taille de grains austénitiques conditionne la taille des nodules pour des vitesses de refroidissement continu élevées (industrielles). Or, la taille d'un nodule est conditionnée par son environnement de croissance, ce qui est vrai aussi pour la taille d'un îlot : $n_d \propto \rho_N^{-1}$ où ρ_N est la densité de sites de germination des colonies, en général proportionnel à la densité de joints de grain austénitiques. Donc, plus la taille des grains d'austénite est petite, plus la taille des colonies sera faible.

La différence entre une colonie et un îlot perlitique tel qu'il a été défini précédemment est de nature morphologique : le plan des lamelles d'un îlot est unique alors que dans une colonie, plusieurs désorientations du plan des lamelles sont possibles (du fait de la nature de l'interface entre la ferrite et la cémentite, voir plus loin). Il peut donc exister une corrélation de la cristallographie de la ferrite entre deux îlots d'une même colonie, ce qui n'est pas le cas pour deux îlots de colonies différentes (d'un même grain γ ou non). Par contre, deux îlots d'une même colonie peuvent présenter des désorientations relatives quelconques du plan des lamelles (ou plan d'habitats apparent) : il y a donc décorrélation des îlots perlitiques en général au sens cristallographique

⁴ensembles de colonies émergent d'un même centre (sur un joint triple)

⁵ainsi que de la composition en tête de front et de la mobilité relative du carbone et autre élément diffusant

et morphologique, sauf dans le cas d'îlots d'une même colonie, ou la décorrélation est limitée au plan des lamelles.

Nous supposons alors que les îlots perlitiques sont décorrélés et distribués de façon aléatoire dans le volume considéré du matériau du fait du caractère aléatoire des sites de germination de la perlite dans l'austénite⁶. On ne considère pas ici la corrélation cristallographique qui existe entre deux îlots d'une même colonie.

2.4 Nature de l'interface α/θ

La nature de l'interface entre la ferrite et la cémentite de la perlite est fortement liée au processus de croissance de la perlite dans l'austénite, et donc à la nature du front de croissance. Nous avons vu qu'il n'y a pas de relation d'orientation cristallographique connue entre les phases produites et l'austénite : Hillert [43] émet alors l'hypothèse d'un interface de croissance incohérente. Or, dans la description cinétique de la croissance perlitique Cahn & al [47], ainsi que plus récemment Klinger & al [59] font intervenir un processus interfacial de croissance par diffusion et migration de marches. Hackney & al [48] émettent l'hypothèse de cohérence partielle de l'interface perlite/austénite et déterminent la nature semi-cohérente de l'interface α/θ .

La relation d'orientation entre la ferrite et la cémentite dépend de l'épitaxie de l'interface α/θ formée au moment de la germination de la perlite [48]; pour obtenir des lamelles continues, l'énergie interfaciale du plan d'habitat atomique α/θ doit être faible [33], ceci quel que soit le mécanisme de germination. En microscopie électronique en transmission, Zhou & al [37, 38] caractérisent la présence de marches de croissance (mobiles) sur les interfaces α/γ et θ/γ . Ces marches sont susceptibles d'accommoder tout désaccord de maille et ont pour conséquence les courbures du plan d'habitat α/θ apparent ou plan des lamelles.

Les différentes relations d'orientation les plus couramment observées sont :

Isaichev :

$$\begin{aligned} (\bar{1}03)_\theta & \parallel (110)_\alpha \\ [010]_\theta & \parallel [\bar{1}\bar{1}1]_\alpha \end{aligned}$$

Bagaryatsky :

$$\begin{aligned} (001)_\theta & \parallel (11\bar{2})_\alpha \\ [100]_\theta & \parallel [0\bar{1}1]_\alpha \end{aligned}$$

Pitsch-Petch :

$$\begin{aligned} (001)_\theta & \parallel (5\bar{2}\bar{1})_\alpha \\ [100]_\theta & \text{ } 2.6^\circ \text{ de } [13\bar{1}] \end{aligned}$$

⁶distribution aléatoire des joints de grain

Différentes configurations sont représentées sur la figure 2.8.

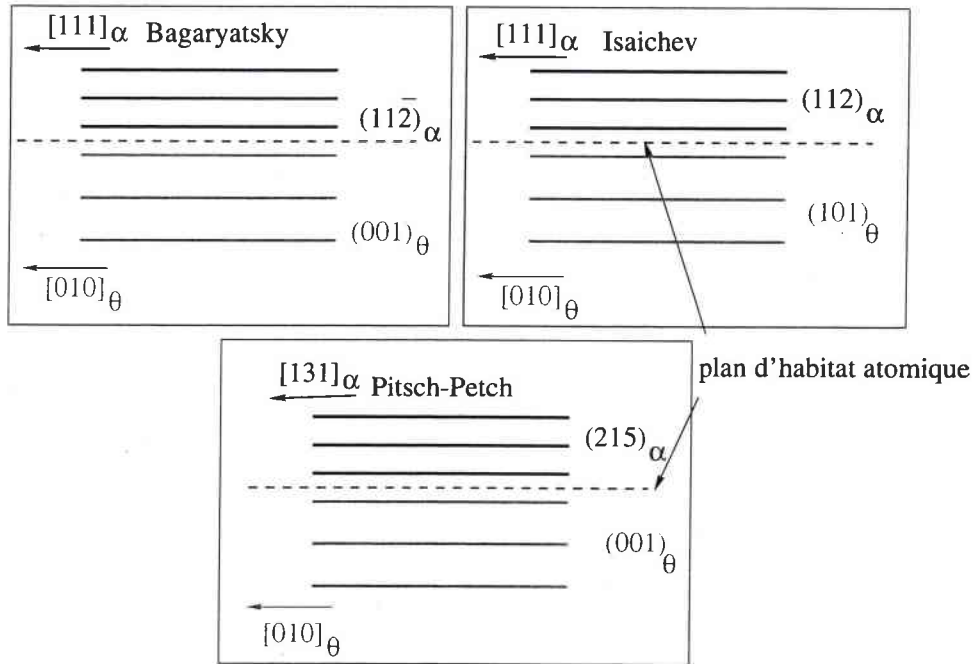


FIG. 2.8 – Représentation des plans cristallographiques de la ferrite et de la cémentite, de part et d'autre du plan d'habitat atomique dans la perlite pour les trois relations d'orientation : Bagaryatsky, Isaichev et Pitsch-Petch [37].

Les relations de Bagaryatsky et Isaichev sont toutes deux faiblement dispersées autour de la direction $[010]_\theta // [111]_\alpha$. D'autres relations d'orientation ont été déterminées, faisant intervenir le plan d'habitat atomique $(001)_\theta // \{110\}_\alpha$ [13].

Le branchement des lamelles et les changements soudains de direction de croissance sont liés au caractère irrégulier du plan d'habitat apparent formé de petites facettes alternées (figure 2.9) comprenant les plans d'énergie interfaciale relativement faible. La présence de marches sur l'interface interlamellaire permet un grand nombre de positions de l'interface (ou plan des lamelles) dans l'espace. Les marches peuvent compenser de diverses façons la rotation apparente du plan de la lamelle par rapport au plan d'habitat atomique. Il est possible d'observer des déviations du plan des lamelles (ou plan d'habitat apparent) par rapport au plan d'habitat atomique allant jusqu'à 30° [37]. Lupton & al [34],[35] notent que la nature duplex⁷ de l'eutectoïde est probablement importante dans la détermination des relations d'orientation dans la perlite. Hackney & al [49] décrivent le facettagement multiple du plan d'habitat par la présence des marches directionnelles⁸ à l'origine du maintien d'un plan d'accrolement de faible énergie interfaciale.

⁷deux constituants se forment simultanément

⁸direction steps

Les plans d'habitat des terrasses des marches les plus couramment cités dans la littérature sont de trois types [37] : Bagaryastky, Isaichev et Pitsch-Petch. Les plans d'accolements ainsi déterminés sont en fait des plans cristallographiques correspondants [58] : le désaccord de mailles engendré par la géométrie des deux phases selon ces plans est faible, et les plans d'habitat atomiques entre la ferrite et la cémentite sont déduits de différentes combinaisons issues des correspondances géométriques entre l'austénite et les phases produites. Cette démarche de détermination des plans d'habitat α/θ est alors en contradiction avec l'hypothèse selon laquelle la cristallographie de l'austénite n'intervient pas dans la cristallographie des phases produites.

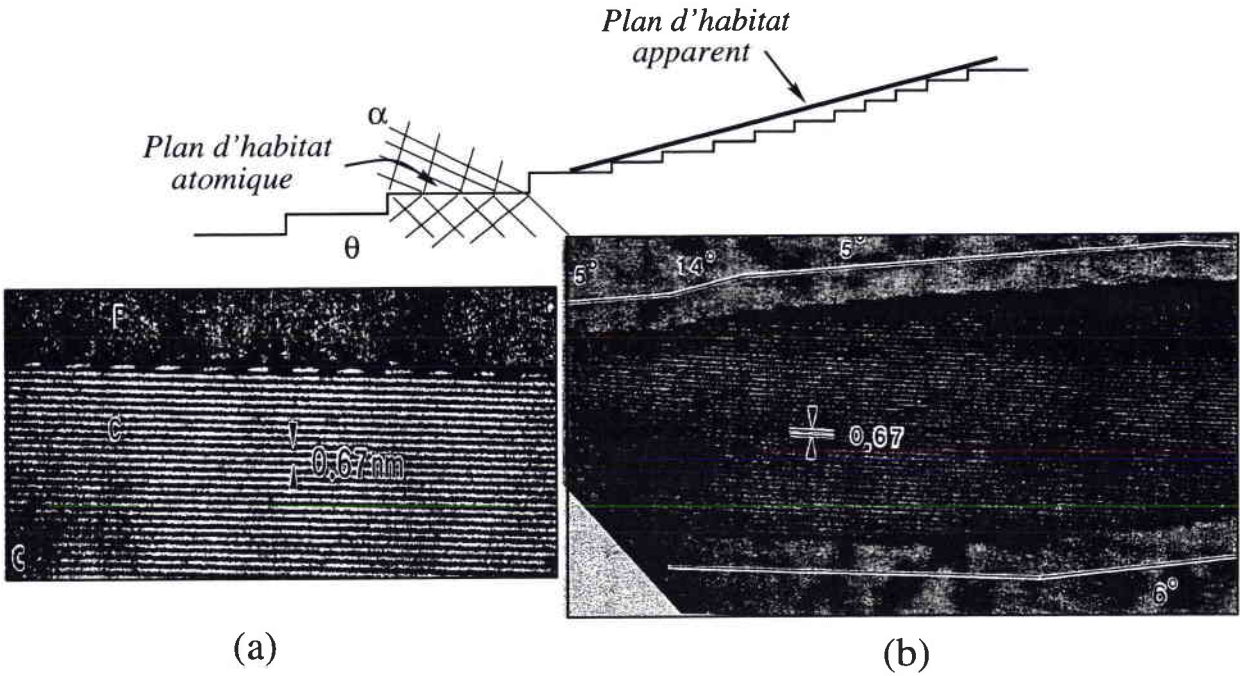


FIG. 2.9 – Illustration schématique du plan d'habitat apparent (ou plan des lamelles (MET)) et du plan d'habitat atomique [57]. A gauche, l'image (MET) donne la structure du plan d'habitat de la cémentite : les plans $(001)_\theta$ sont visibles [38] ; à droite, la variation de l'orientation du plan d'habitat apparent ou plan des lamelles : pour chaque interface, le degré de courbure est indiqué au-dessus et au-dessous de l'interface respective. L'angle de déviation peut aller jusqu'à 30° dans cette configuration [38].

2.5 Relations d'orientation ferrite-cémentite perlitique

Depuis plusieurs dizaines d'années, un nombre conséquent de déterminations expérimentales des relations d'orientations entre les constituants de la perlite ont été mises en évidence [37, 38, 66, 62, 64, 63, 65, 13]. Toutes ces relations d'orientations sont déterminées par diffraction d'électrons dont l'erreur est estimée à 3 – 5 degrés près [39]. Il est donc impossible de distinguer de faibles différences entre les relations d'orientations déterminées par une telle méthode. Par exemple, les relations d'orientation de Bagaryatsky et de Isaïchev diffèrent d'une rotation de seulement 3.59 degrés selon l'axe $[010]_{\theta} // [111]_{\alpha}$, c'est pourquoi celle d'Isaïchev est souvent attribuée à une erreur expérimentale. Pourtant, le plan d'habitat atomique de la relation d'Isaïchev diffère de 56° de celui de la relation de Bagaryatsky, il ne peut donc y avoir de confusion entre ces deux relations d'orientation [39].

Récemment, Zhang & al [39] ont proposé une détermination plus précise de ces relations d'orientation par l'usage des lignes de Kikuchi des clichés de diffraction, obtenant ainsi une précision de l'ordre de 0.5 degrés. Leur étude mène à la détermination de trois nouvelles relations d'orientation pour l'eutectoïde notées respectivement n°2, 3 et 4 par les auteurs (voir tableau 2.1). Les deux premières (2–3) sont proches de l'orientation de Pitsch-Petch, la troisième, proche de la relation d'orientation trouvée par Darken et Fischer [13]. Zhang & al [39] ne trouvent jamais les relations de Pitsch-Petch et de Bagaryatsky : la relation d'Isaïchev est retrouvée dans l'acier hypoeutectoïde.

Ces conclusions montrent que des trois relations d'orientation les plus souvent reportées dans la littérature, seule la dernière née controversée -Isaïchev-, existe dans un acier hypoeutectoïde. Les deux autres -Pitsch Petch et Bagaryatsky- sont des extrapolations de la géométrie d'accrolement des phases. Bien que les relations d'orientation réelles n°2 et n°3 soient proches de Pitsch-Petch (voir tableau 2.1), les trois relations d'orientation les plus couramment citées (Bagaryatsky, Isaïchev et Pitsch-Petch) n'existent pas dans un acier eutectoïde. Les relations d'orientations entre la ferrite et la cémentite de la perlite sont [39] :

$n^{\circ}2$		
$(\bar{1}03)_{\theta}$	$\parallel$	$(111)_{\alpha}$
$[010]_{\theta}$	8.5°	$[131]_{\alpha}$
$[3\bar{1}\bar{1}]_{\theta}$	$\parallel$	$[\bar{1}\bar{1}1]_{\alpha}$
$n^{\circ}3$		
$(022)_{\theta}$	$\parallel$	$(111)_{\alpha}$
$[100]_{\theta}$	2.4°	$[\bar{1}\bar{3}1]_{\alpha}$
$[311]_{\theta}$	$\parallel$	$[\bar{1}\bar{1}1]_{\alpha}$
$n^{\circ}4$		
$(210)_{\theta}$	$\parallel$	$(111)_{\alpha}$
$[001]_{\theta}$	$\parallel$	$[131]_{\alpha}$
$[\bar{1}21]_{\theta}$	5.95°	$[101]_{\alpha}$

TAB. 2.1 – Relations d'orientation cristallographique entre la ferrite et la cémentite de la perlite (acier 0.8C – 0.29Mn – 0.13Si) [39].

2.6 Effets des éléments d'alliage

La croissance perlitique est contrôlée par une diffusion du carbone au voisinage de l'interface de croissance, comme suggéré par Hillert [41, 42, 43, 46], Kirkaldy[14, 15] et Sunquist[16], plus récemment Klinger [59]. Les éléments substitutionnels du fer sont peu susceptibles d'affecter la diffusion du carbone qui est un élément interstitiel. Pourtant la vitesse du front de croissance est modifiée pour les aciers alliés. Un autre paramètre doit être pris en compte : le coefficient de ségrégation au voisinage du front de transformation. En effet, la température à laquelle la perlite se forme permet la diffusion des éléments d'alliage au front de croissance, donnant lieu à une partition de ces éléments entre les constituants de la perlite. Williams & al [17] ont caractérisé une partition significative de chrome, manganèse et silicium (voir figure 2.10). La concentration en éléments d'alliage peut augmenter au front de croissance. De nombreux aciers perlitiques alliés possèdent une vitesse de croissance V faible et un espacement interlamellaire fin. La combinaison de ces caractéristiques est alors attribuée à l'interaction entre les atomes solutés en substitution et le front de croissance, donnant lieu à une réduction du coefficient de diffusion apparente du carbone et des forces motrices pour la diffusion [67].

L'effet des éléments d'alliage est de déplacer le domaine de composition et température de transformation eutectoïde (voir figure 2.11). La trempabilité de l'acier est aussi modifiée. Les éléments d'alliage qui possèdent une forte affinité avec le carbone vont augmenter la résistance de la cémentite, et sont susceptibles d'affiner les lamelles de renfort. La présence d'éléments comme le chrome ou le manganèse augmente la dureté de la cémentite, au contraire d'un élément comme le nickel [67].

Enfin, le caractère durcissant de certains éléments d'alliage comme le cuivre ou le manganèse peut être associé à l'état de précipitation ou solution solide des ces éléments dans les deux phases, ou à l'interface [93].

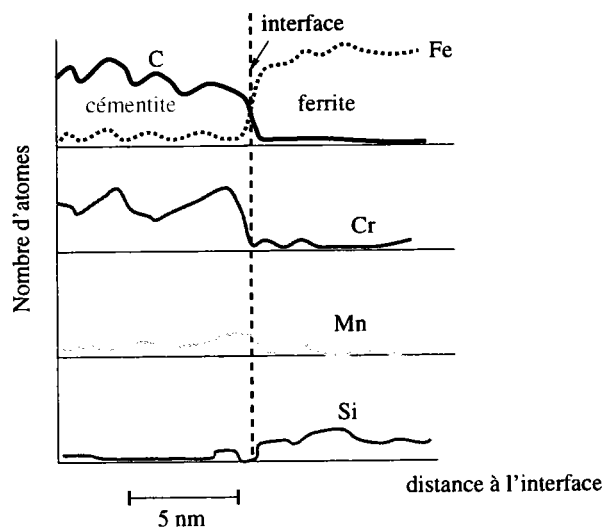


FIG. 2.10 – Profil de concentration à travers l'interface cémentite ferrite, après une transformation d'une durée de 2mn à 517°C. Représentation schématique des résultats de [17].

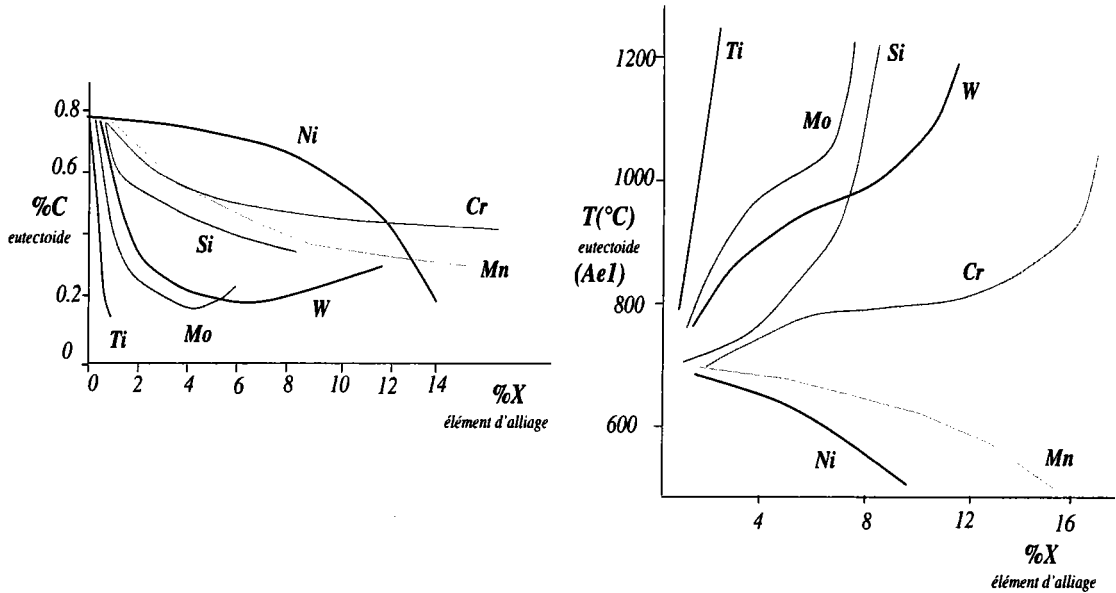


FIG. 2.11 – A gauche, déplacement de la teneur en carbone de l'eutectoïde pour des éléments d'alliage courants. A droite, déplacement de la température eutectoïde, d'après [68, 67].

2.7 Conclusion

La complexité de la morphologie perlitique ne permet pas une prise en compte globale de tous les paramètres microstructuraux. Toutefois, il est possible de contrôler la finesse de la microstructure, par la taille des ilots (influence de l'austénite parente) ainsi que par la taille des lamelles (influence de la vitesse de refroidissement et de la composition initiale de l'acier). Il suffit d'adapter le procédé de refroidissement à la nuance de l'acier, ou de déterminer la vitesse critique de trempe pour conclure sur la faisabilité technique d'un laminage au train à fil industriel pour une nuance perlitique donnée.

On retiendra trois échelles de description de la microstructure :

- . celle de l'interface ferrite/cémentite, dont on connaît les relations d'orientation entre phases et la position du plan des lamelles (ou plan d'habitat apparent) ;
- . celle d'une lamelle supposée monocristalline ;
- . celle de l'îlot perlitique, constitué d'un ensemble de lamelles parallèles alternées de ferrite et de cémentite (de continuité cristallographique et morphologique connue).

Cette décomposition de la morphologie perlitique correspond aux diverses échelles déterminantes pour les mécanismes de déformation générés par la mise en forme de la perlite. De par la complexité de la microstructure, il est en effet nécessaire d'étudier les modes de déformation du composite biphasé -l'îlot- de façon simplifiée.

Le principal effet -à l'échelle la plus fine- est que l'e.i. détermine le libre parcours moyen des dislocations dans la ferrite. Le caractère anisotrope de la déformation de l'îlot -à l'échelle supérieure- est caractéristique de l'hétérogénéité mésoscopique de la déformation de la perlite (composite poly-îlot). De fait, il est nécessaire, pour la déformation de la perlite aussi de considérer plusieurs échelles de description.

Ainsi l'hypothèse d'une interface ferrite/cémentite partiellement cohérente, ainsi que la décorrélation des îlots sont les bases de la démarche de modélisation proposée dans les parties 3 à 5.

3

Mécanismes de déformation/Tréfilabilité

La déformation de la perlite est fortement dépendante de la finesse de la microstructure. Ainsi, les mécanismes élémentaires de déformation sont différents d'une perlite fine à une perlite grossière. Si on admet généralement que la majeure partie de la déformation est accommodée élastoplastiquement par la ferrite, le renfort possède aussi une certaine ductilité dans le cas d'une structure fine (nanomatériau).

Lors du tréfilage, l'état de triaxialité des contraintes autorise un écoulement plastique de la cémentite. On observe après plusieurs passes en tréfilage une réduction de l'e.i. en proportion du diamètre du fil : c'est le principe de similitude de Embury [1]. Cette observation dénote de l'importance de l'évolution de la morphologie perlitique lors de l'accommodation de la mise en forme.

3.1 Déformation de la perlite

Dans le cas d'une perlite grossière ($\lambda_p =$ qqes $1\ \mu\text{m}$), la déformation est fortement hétérogène. Elle est localisée dans des bandes de cisaillement de la ferrite, résultant d'instabilités plastiques (empilements de dislocations). L'état de contraintes local ne permet pas la déformation plastique de la cémentite, ni la formation de cellules de dislocations dans la ferrite [69]. Les lamelles de renfort ont un comportement fragile et la rupture a lieu à l'intersection des lamelles et des zones de forte densité de dislocations de la ferrite [67].

Pour une perlite fine ($\lambda_p =$ qqes $0.1\ \mu\text{m}$), la déformation plastique est plus homogène. Le libre parcours moyen des dislocations de la ferrite est déterminé par la distance $\beta\lambda_p$ entre obstacles, et l'orientation (Θ) des plans de glissement par rapport au plan des lamelles ($\beta = \cos^{-1}\Theta$) ou plan d'habitat. Le caractère discret du comportement des dislocations devient déterminant.

3.1.1 Comportement des dislocations

Le glissement des dislocations dans les lamelles de ferrite d'un acier non tréfilé a été récemment caractérisé par N. Guelton [71] et F. Louchet [19]. On suppose ici que la dimension d'une lamelle interdit la formation d'empilements statistiques de dislocations dans un sens transverse aux lamelles. Dans ce cas, un champ homogène de déformation plastique se développe dans les lamelles [2] (voir figure 3.1). Langford [4] note qu'à cette échelle, les lamelles de cémentite sont "chargées"

par les dislocations individuelles de la ferrite, et l'écoulement dans la ferrite est représenté par une relation de type Hall-Petch, de la forme :

$$\sigma^f = \frac{\mu b}{3} \frac{1}{\lambda_p} \quad (3.1)$$

Dollar & al [61] montrent que les sources de dislocations pour la ferrite perlitique se situent à l'interface ferrite/cémentite. Cette conclusion a été confirmée par Copreaux & al [67]. Les observations au microscope en transmission de N. Guelton [71] corroborent le modèle de Porter & al. [54] : les 'empilements' de dislocations sont courts et rapprochés dans une perlite moyenne et longs et espacés dans une perlite grossière. Il n'y a pas d'empilements de dislocations dans une perlite fine.

Guelton et Louchet [71, 19] mettent en évidence la présence de superpositions de demi-boucles de dislocations dans une lamelle de ferrite, glissant individuellement sur différents plans cristallins et laissant des brins de dislocations à caractère coin aux interfaces α/θ . Ce mode de déformation correspondrait à l'accommodation des hétérogénéités de déformation entre le ferrite et la cémentite. Enfin, N. Guelton [71] note la présence de nombreuses dislocations aux interfaces.

La présence d'un grand nombre d'interfaces dans la structure lamellaire est donc déterminante dans les mécanismes de déformation. Cette conclusion est cohérente avec les relations microstructure-propriétés établies sur des essais de traction de la perlite ; dans tous les cas, la contrainte d'écoulement de la perlite est liée à l'e.i. (moyen) par une relation de Hall-Petch en λ_p^{-1} ou $\lambda_p^{-1/2}$. Il y a compétition entre les sources de Frank-Read multipliant les dislocations dans la ferrite et la germination de dislocations à l'interface pour accommoder les incompatibilités de déformation à l'interface entre constituants. Plus la perlite est fine, plus la germination de dislocations aux interfaces est déterminante (les sources de Frank-Read deviennent difficiles à activer) [19].

Remarque

F. Louchet [19] note que dans une perlite fortement tréflée ($\lambda_p = \text{qqesnm}$), la propagation des dislocations d'accommodation nécessite une contrainte proche de la limite théorique. Un autre mécanisme de déformation de la perlite doit entrer en compétition. Il y a, dans ce cas, saturation de la contrainte nécessaire à l'écoulement plastique dans les lamelles de ferrite, et la relation de Hall-Petch n'est plus valable. Nous verrons que dans le cas étudié, la configuration des dislocations d'accommodation des incompatibilités plastiques aux interfaces est déterminante.

3.1.2 Contraintes résiduelles

Récemment, Belassel [76] a caractérisé par diffraction des rayons X les contraintes résiduelles dans la perlite sous différents types de chargement. Les résultats obtenus aux rayons X montrent que dans la cémentite, les contraintes résiduelles sont très fortes (de l'ordre de +2 GPa), et de l'ordre de -500 MPa dans la ferrite, pour une perlite relativement fine. Il trouve aussi une baisse des contraintes résiduelles dans la cémentite, après environ 3% de déformation de traction. Cette baisse, notable pour les aciers hypereutectoïdes (figure 3.2) peut être liée à l'endommagement du matériau par la fissuration des lamelles de renfort, et aux relaxations de ces contraintes. Nous verrons dans ce travail qu'elle peut probablement aussi résulter d'un transfert de charge des lamelles de cémentite vers les lamelles de ferrite dans le cas d'une structure suffisamment fine

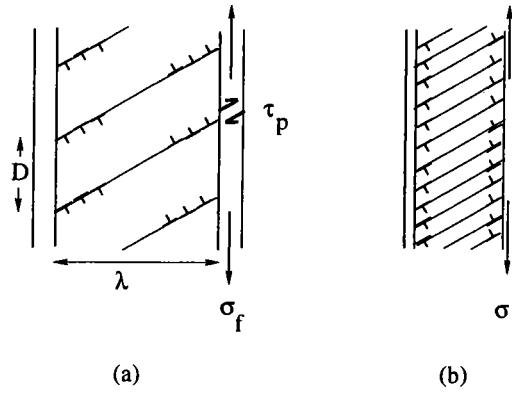


FIG. 3.1 – Modèle de la déformation de la perlite alignées parallèlement à l'axe de sollicitation, illustrant (a) un glissement grossier et (b) un glissement fin dans la ferrite [54].

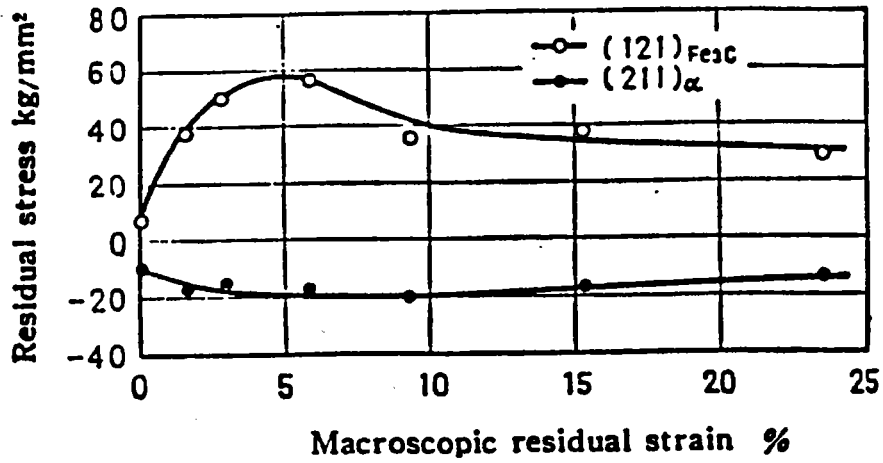


FIG. 3.2 – Evolution des contraintes résiduelles dans la ferrite et la cémentite en fonction de la déformation plastique dans un acier hypereutectoïde [76].

(nanomatériau).

3.1.3 Conclusion

La déformation dans la perlite est donc fortement liée aux mécanismes d'écoulement plastique dans la ferrite, eux-mêmes fonctions du rôle qu'adopte le renfort intermétallique. Si on peut admettre aujourd'hui que la cémentite se déforme plastiquement, c'est la force motrice qui génère ou multiplie les dislocations dans la ferrite qui reste déterminante dans l'analyse du comportement de la perlite. Dans le cas présent, c'est à dire pour des perlites fines (quelques 100nm à quelques 10nm), l'expression (3.1) décrit bien le phénomène de 'charge' du renfort par des dislocations individuelles, et la déformation est relativement homogène dans les lamelles, hétérogènes entre lamelles voisines.

La limite d'élasticité de la perlite est alors conditionnée par l'e.i. mais aussi par la géométrie du glissement par rapport au plan des lamelles et à l'orientation de la sollicitation. Si on considère localement que de multiples configurations géométriques et morphologiques se retrouvent dans la perlite, on comprend que la limite d'élasticité de la perlite soit diffuse. Dans ce cas, il est plus approprié de caractériser le début de la plasticité de la perlite par la microplasticité qui tient compte de l'activation successive des systèmes de glissement.

3.2 Structure du glissement dans les constituants de la perlite

3.2.1 Ferrite

A l'échelle atomique, on peut supposer que les déplacements élémentaires dus au mouvement des dislocations sont de nature cristallographique dans la ferrite [84]. Les observations expérimentales montrent que ce glissement est composé, sur deux familles de plans, $\{110\}$ et $\{112\}$. La ferrite est supposée s'écouler sur la famille de plans $\{110\}$, de multiplicité 6 selon la famille de directions de glissement $\{111\}$, de multiplicité 4 : soient 24 systèmes de glissement. Cette configuration est la plus courante, puisqu'elle concerne les matériaux ferreux faiblement alliés au carbone, ou alliés à d'autres éléments, type Ni ou encore Si, Al..., ce qui est le cas d'aciers industriels. On ne considère pas ici le glissement qui a lieu sur les plans $\{112\}$ ni le phénomène de mûlage.

3.2.2 Cémentation

La ductilité de la cémentite est caractérisée dans le cas du tréfilage. Selon Gil Sevillano [53], les lamelles de cémentite extraites d'un acier eutectoïde tréfilé à $\epsilon = 0.43$ montrent des bandes droites (probablement des bandes de glissement, associées aux traces des plans $\{100\}, \{110\}$). Ces lieux portent une forte densité de dislocations [54], alors qu'à l'extérieur des bandes, la cémentite semble posséder peu de défauts, mettant en évidence l'absence de glissement dévié. Les vecteurs de Burgers sont le plus probablement ceux portés par les directions principales du réseau orthorhombique, soit $\langle 100 \rangle$. Les dislocations partielles $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$, issues de la décomposition du vecteur de Burgers $\langle 111 \rangle$ [10], interagissent avec les dislocations de la structure pour former des ancrages où la cémentite peut se fissurer. Toutefois, de multiples observations montrent une forte densité de dislocations sur les plans (001) de la structure orthorhombique. Il s'agit là d'un plan déterminant dans la formation de réseaux de dislocations [53] et de micro-fissures [9].

Les directions de glissement les plus probables sont $[010]$, $[001]$, $[111]$ ainsi que des dislocations partielles de direction $\frac{1}{2} < 111 >$.

Les vecteurs de Burgers sont difficilement identifiables, mais la direction de glissement $[111]$ est souvent observée [53].

3.3 Le tréfilage de la perlite

La perlite tréfilée peut atteindre une résistance de 4.9 GPa (soit $\mu/13$)⁹ en laboratoire [73], soit la résistance spécifique (R_m/μ) ¹⁰ la plus élevée après les whiskers.

La tréfilabilité peut être définie comme étant l'aptitude d'un fil à être mis en forme par des passes successives de tréfilage à froid, sans rupture ou endommagement notable du matériau, ni pour la filière dans le contexte d'une productivité optimale (grande vitesse de déformation, minimum de traitements thermiques) et en obtenant les propriétés mécaniques souhaitées. Les fils, d'un diamètre initial de quelques dizaines de millimètres, peuvent atteindre des dimensions inférieures au millimètre aux forts taux de tréfilage.

3.3.1 Courbes d'écrouissage en tréfilage

On caractérise l'écrouissage en tréfilage par la courbe résistance mécanique en tréfilage en fonction de la réduction de section du fil S/S_o , ou la déformation de tréfilage

$$\epsilon_t = \ln \frac{S_o}{S}$$

Langford et Cohen [51] ont montré qu'il suffisait de porter la résistance à la traction d'un fil perlitique en fonction de sa déformation au tréfilage pour décrire correctement l'écrouissage de la perlite en tréfilage. La courbe d'écrouissage typique de la perlite est donnée figure (3.3) .

Si on suppose que la déformation en tréfilage est très largement supérieure à celle d'un essai de traction, la résistance du fil correspond à l'écrouissage en tréfilage ; la contribution de l'essai de traction est négligeable selon Langford et Cohen [51].

Par contre, la réorganisation structurale qui se produit lors du changement de trajet (tréfilage -traction) engendre des contraintes internes (paragraphe 6) pouvant localement altérer la contrainte d'écoulement [2]. Cet effet devient probablement significatif avec une mise en forme plus sévère, mais la déformation du matériau engendrée par la mise en forme reste déterminante.

Nous supposons que l'écrouissage en tréfilage est ainsi correctement caractérisé.

Les observations in-situ en microscopie électronique en transmission [71, 72] montrent qu'aux faibles déformations en tréfilage, un mécanisme de multiplication de dislocations par contournement d'Orowan des lamelles courtes de cémentite caractérise la déformation. Aux fortes prédeformations en tréfilage, un mécanisme de propagation sans augmentation de la longueur de la ligne de dislocation a lieu. Expérimentalement, l'absence de saturation de la courbe d'écrouissage signifie que ce dernier mécanisme de déformation n'est pas déterminant pour $\epsilon_t < 4$.

⁹ μ est le module macroscopique de cisaillement du matériau

¹⁰ R_m est la résistance en traction à la striction du matériau

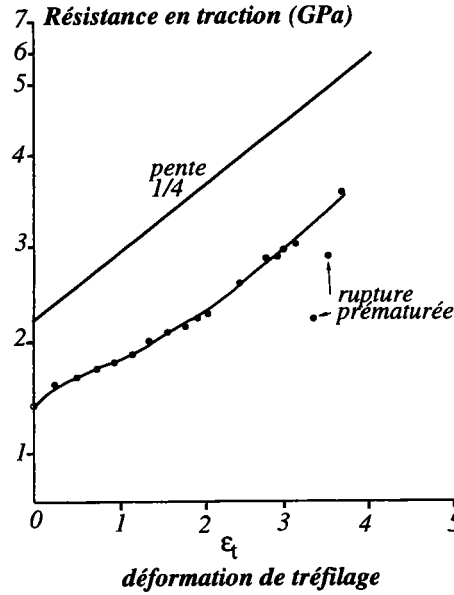


FIG. 3.3 – Courbe d'écrouissage d'un fil perlitique à 0.94%C, allié au manganèse, de diamètre initial 5.6mm [3]

3.3.2 Principe de similitude

Embury et Fisher [2] montrent que l'écrouissage de la perlite est décrit par une variation exponentielle de la contrainte d'écoulement de la perlite, en fonction de la déformation en tréfilage :

$$\sigma - \sigma_o \propto e^{\frac{\epsilon_t}{4}} \quad (3.2)$$

Si on applique le principe de similitude, l'espacement interlamellaire λ à un instant t ou à la déformation ϵ_t du tréfilage est proportionnel au diamètre $d = \sqrt{S/\pi}$ du fil. D'après la définition de la déformation de tréfilage (voir paragraphe précédent), on a

$$\epsilon_t \propto -2\ln(d) \quad (3.3)$$

soit, en reprenant l'équation (3.2) :

$$\sigma - \sigma_o \propto \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \quad (3.4)$$

On retrouve alors la forme de l'équation de Hall-Petch. Cette forme simple de dépendance entre l'écrouissage macroscopique de la perlite au tréfilage et la microstructure est vérifiée expérimentalement pour une perlite fine. Toutefois, elle ne permet pas de conclure sur le mécanisme élémentaire déterminant. Nous avons vu que l'effet de taille des lamelles a pour conséquence, à l'échelle locale, une dépendance en $1/\lambda$ de la contrainte nécessaire au mouvement des dislocations. Contrairement aux apparences, cette contradiction n'est pas une : plusieurs échelles sont ici en jeu. Nous montrerons plus loin que le comportement discret des dislocations (phénomène de 'charge' du renfort) résulte en une courbe d'écrouissage de la forme sus-citée.

3.3.3 Evolution de la microstructure

Nous avons vu que la perlite étudiée contient une seconde phase quasi-continue sous forme lamellaire. Ce composite peut supporter des déformations en tréfilage élevées. Après de telles déformations, la microstructure se compose de lamelles ou de fibres [70] alignées dans la direction de tréfilage et présente un facteur de forme élevé. Le stockage de dislocations dans la microstructure et le développement d'une sous-structure de dislocations dans les phases en présence est fortement dépendant de l'e.i. vrai.

Dans le cas étudié, la microstructure initiale de la perlite (l'e.i. est d'environ 100nm)

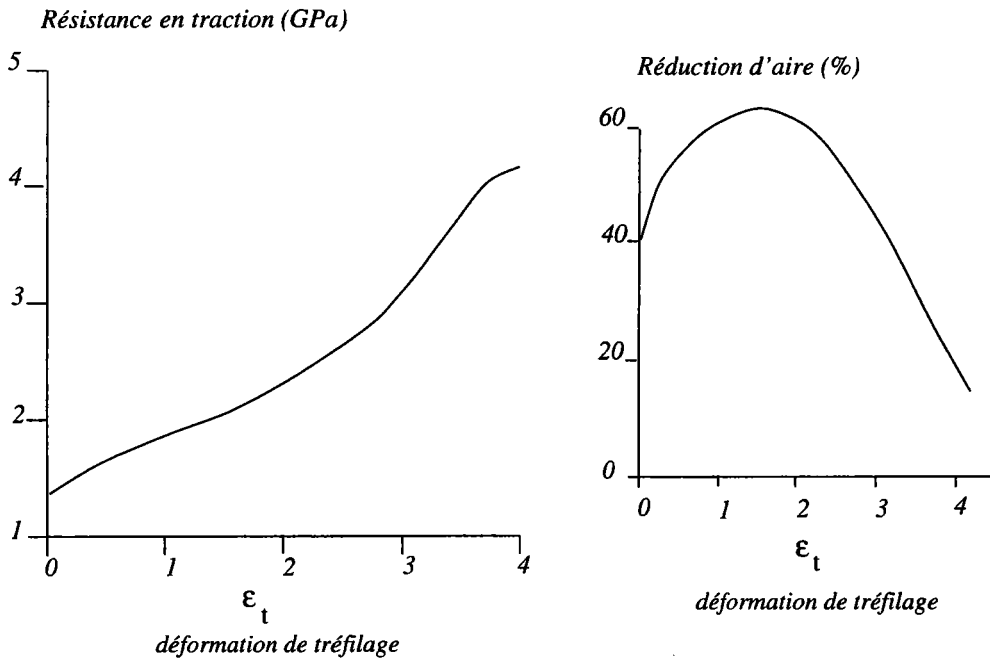


FIG. 3.4 – Evolution des caractéristiques mécanique au cours de l'écrouissage en tréfilage [74]

est suffisamment fine et la ferrite semble être exempte de sous-structure de dislocations après une déformation en tréfilage importante [75]. Le libre parcours moyen des dislocations dans la ferrite est déterminé tout au long du tréfilage par l'épaisseur des lamelles de ferrite. Les dislocations interagissent fortement avec les interfaces et viennent s'y accumuler.

L'évolution des caractéristiques mécaniques d'un fil perlitique au cours de l'écrouissage en tréfilage est donnée dans la figure (3.4).

Pour des taux de réduction ($1 - S/S_0$) inférieurs à 75% ($\epsilon_t = 1.4$), l'augmentation de la résistance du fil est lente et progressive; elle est liée à la phase d'allongement des îlots de perlite, due à la déformation en tréfilage, formant des structures appelées fibres, de forme très irrégulière. Au-delà de $\epsilon_t = 1.4$, on observe une accélération progressive des phénomènes de durcissement, due au fait que le fil est constitué de fibres plus régulières et plus fines; la ductilité du fil est nettement améliorée par ce phénomène d'affinement. Enfin, pour $\epsilon_t = 3$, le matériau écroui devient fragile et les charges à rupture peuvent atteindre des valeurs très élevées. Le rôle des constituants

mineurs est ici déterminant dans l'apparition prématurée des fissures.

La ferrite présente une forte texture $\langle 110 \rangle$ dans la direction de l'axe du fil après un tréfilage intense. Ce phénomène a pour conséquence un mode de déformation local plan des îlots, alors que la mise en forme macroscopique du fil est à symétrie axiale.

Enfin, bien qu'il ne soit pas traité dans ce travail, il est nécessaire de mentionner le phénomène de dissolution de la cémentite qui est effectif à partir des déformations moyennes [103]. Les fortes distorsions élastiques et la présence d'une grande fraction d'interfaces et de défauts dans la structure favorisent la diffusion du carbone. Lors de ce processus, la ferrite s'enrichit en carbone, et la cémentite laisse la place à des barrières d'interphase complexes [75].

3.4 Conclusion

A cette échelle, on s'approche du comportement des nanomatériaux, pour lesquels le caractère discret du mouvement des dislocations est déterminant. Ces matériaux lamellaires présentent un intérêt particulier pour l'exploration des échelles de longueur en plasticité ¹¹. Le cadre défini pour l'étude concerne des perlites dont l'espacement interlamellaire initial est de l'ordre de 100nm.

A l'échelle d'une lamelle, il est possible d'approcher le matériau par le formalisme d'Eshelby [18]. En effet, une demi-boucle de dislocation de la ferrite peut être assimilée à une inclusion hétérogène ellipsoïdale de faible épaisseur, dont la frontière est mobile [78], la géométrie du glissement superposée à la présence de 'murs' de cémentite permet alors de modéliser un mécanisme de stockage de défauts à l'interface. Cette étude fait l'objet de la troisième partie de ce mémoire.

A ces micro-mécanismes déterminants de la déformation en tréfilage de la perlite se superpose l'évolution morphologique de la structure : l'accommodation aux interfaces et les textures développées au cours du tréfilage provoquent la réorientation des lamelles et la modification de l'e.i., donc du libre parcours moyen des dislocations. On peut voir alors les îlots de perlite comme des grains plus ou moins ductiles en fonction de l'orientation des lamelles par rapport à la sollicitation et de leur épaisseur.

¹¹La lecture des mécanismes déterminants en fonction des dimensions de la sous-structure est proposée par Misra & al. [25] sur des cartes de type Ashby

Effet d'espacement interlamellaire

La particularité de la déformation des îlots perlitiques lors du tréfilage de la perlite est liée à la géométrie plane de l'écoulement local (au niveau de l'îlot), due à la texture $\langle 110 \rangle$ développée dans la ferrite (effet Hosford). Imaginons un ensemble de lamelles parallèles (îlot), soumis à une déformation plane inclinée par rapport aux lamelles : le comportement de l'îlot est à l'échelle des lamelles celui d'un 'paquet de cartes' (mécanisme 'deck-of-cards' [3], figure 4.1). L'hétérogénéité de déformation à l'intérieur de l'îlot est alors caractérisée par les différences de comportement des deux phases de la perlite.

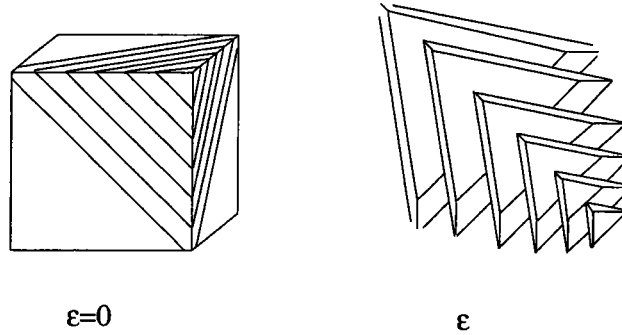


FIG. 4.1 – Représentation schématique du processus de déformation plane (ou cisaillement) de l'îlot par cisaillement interlamellaire hétérogène (mécanisme du 'paquet de cartes'). L'orientation des lamelles change et le mécanisme est une elongation plane sans modification sensible de l'espacement interlamellaire [3].

4.1 Effet composite : orientation des colonies

Intéressons-nous à l'évolution de l'orientation des lamelles par rapport à l'axe de sollicitation. Lors du tréfilage, il y a réorientation graduelle de la structure lamellaire vers l'orientation de l'axe du fil. Si chaque phase se déforme de façon homogène, la réorientation évolue avec la déformation de tréfilage ϵ_t selon :

$$\alpha = \arctan(e^{-\frac{3}{2}\epsilon_t} \tan \alpha_0) \quad (4.1)$$

où α_0 est l'orientation initiale de la lamelle par rapport à l'axe de sollicitation.

Pour une déformation en tréfilage $\epsilon_t = 2$, environ 70% des colonies ont une orientation

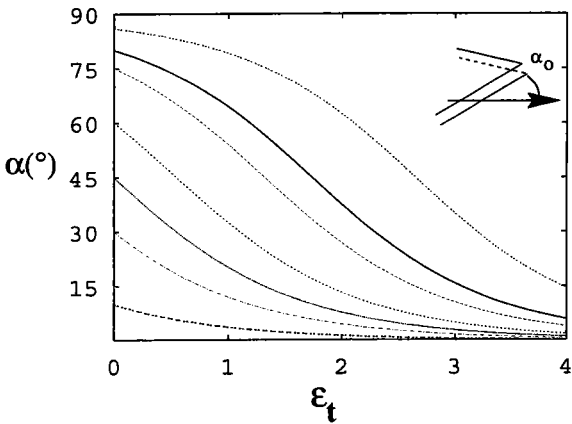


FIG. 4.2 – Réorientation d'une structure initiale aléatoire avec la déformation selon l'hypothèse de déformation homogène, [53].

contenue dans un cône de 30° autour de l'axe du fil ; pour $\epsilon_t = 4$, les colonies sont orientées à 10° de l'axe du fil (figure 4.2).

Cependant, tous les îlots ne présentent pas la même évolution de l'espacement entre lamelles. Aux premiers stades de tréfilage, les îlots possédant une orientation plus ou moins perpendiculaire à l'axe du fil tendent à se courber pour adopter une texture morphologique en rubans ou effet de curling, visible selon une coupe perpendiculaire à l'axe du fil [1]. Les autres îlots se déforment par glissement discret dans des plans de glissement plus ou moins espacés. Ces caractéristiques microstructurales reflètent le comportement local de déformation plane des îlots perlitiques et la courbure nécessaire à l'accommodation du comportement global axisymétrique du matériau lors de sa mise en forme.

A l'échelle d'un ensemble d'îlots, il est possible de décrire l'hétérogénéité du matériau en distinguant le comportement d'un îlot en fonction de l'orientation des lamelles (figure 4.3). Les îlots dont les lamelles sont perpendiculaires au plan de déformation dans la ferrite sont plus résistants que les îlots voisins. Ces îlots se comportent comme des renforts dans une matrice (fictive) plus ductile ; leur modification morphologique peu affectée par le voisinage, ils deviennent fortement perturbés (figure 4.3) du fait de la sollicitation macroscopique. Les îlots dont les lamelles sont approximativement parallèles au plan de déformation tendent à être plus ductile que le voisinage et se comportent comme des inclusions fortement ductiles par rapport à la matrice plus fragile ; l'évolution de la morphologie de ces îlots est fortement liée à leur voisinage. Les îlots qui présentent une inclinaison par rapport au plan de déformation montrent un autre effet : la géométrie du glissement dans la lamelle de ferrite mène à une production presque illimitée de dislocations $\langle 111 \rangle$ dans la direction parallèle au plan d'élongation. En conséquence, l'îlot très ductile en cisaillement selon ce dernier plan, va opérer un mécanisme mésoscopique de 'paquet de cartes' (figure 4.1), fonction des contraintes de l'environnement.

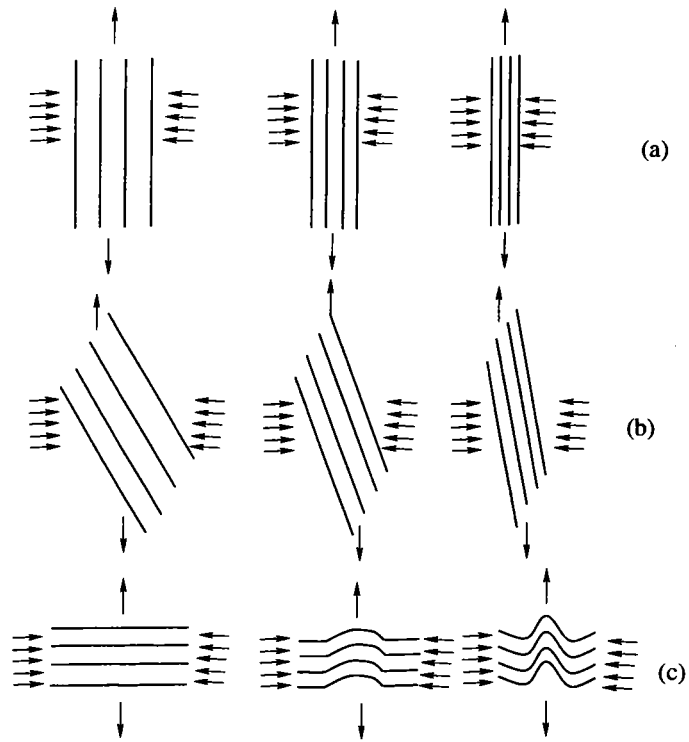


FIG. 4.3 – Représentation schématique de l'évolution morphologique des lamelles en fonction de leur orientation initiale avec l'axe de sollicitation. Trois types d'arrangements lamellaires sont proposés : (a) orientation initiale parallèle, (b) resp. inclinée, (c) resp. perpendiculaire. L'évolution dans le temps est de gauche à droite lors d'un tréfilage. [30]

A cette échelle, il existe donc une caractérisation spécifique de l'évolution de la morphologie lamellaire (c'est à dire espacement interlamellaire et orientation du plan des lamelles) avec la déformation. On a vu que les lamelles tendent à s'orienter vers l'axe de sollicitation, selon une déformation axisymétrique imposée, mais que le processus local correspond davantage à une élongation plane, liée à la texture de tréfilage de la ferrite. Malgré ces effets, l'évolution de l'espacement interlamellaire moyen semble être liée à la déformation de tréfilage comme s'il n'y avait pas de texture du tout.

Le principe de similitude est applicable à une échelle globale de la microstructure. Si la déformation ϵ_t est bien une grandeur macroscopique mesurée, l'e.i. moyen représente une valeur moyenne de la distribution réelle des e.i. vrais ; l'évolution de l'e.i. local est liée à la géométrie de l'îlot et à son environnement. Le principe de similitude n'est alors qu'une approximation utile assez grossière de ce qui se passe réellement dans le matériau.

4.2 Evolution de l'espacement avec la déformation

Les limites du principe de similitude ont été mis en évidence par Toribio [30]. Pour les îlots les plus résistants, les modifications de l'espacement interlamellaire correspondent à l'évolution macroscopique. Les îlots les plus ductiles se déforment selon une géométrie plus axisymétrique et l'évolution de l'espacement interlamellaire est plus rapide que celle attendue. Les îlots intermédiaires subissent une déformation plane qui limite l'évolution de l'espacement interlamellaire. Rappelons ici que la mesure de l'espacement interlamellaire est une opération délicate, d'autant plus lorsque le taux de tréfilage augmente.

Toribio & al [30] ont caractérisé l'évolution de l'espacement interlamellaire avec l'affinement de l'échantillon macroscopique (figure 4.4).

Trois régimes semblent opératifs en fonction du taux de tréfilage. Cette observation peut justifier de l'effet couplé de la réorientation des lamelles dans les îlots, et de la réduction de l'espacement en fonction du mode local de déformation. Les îlots dont les lamelles sont parallèles à l'axe de sollicitation sont peu résistants à la réduction de dimension dans le sens transverse, alors que les îlots dont les lamelles sont perpendiculaires à l'axe offrent plus de résistance à ce même effort et les lamelles tendent à se plier (voir figure 4.5). Dans le cas intermédiaire, il y a d'abord une rotation des lamelles vers l'axe du fil puis une réduction supplémentaire de l'espacement. Ces arguments suffisent à justifier des résultats de Toribio & al [30].

L'effet de la texture de la ferrite semble peu affecter l'évolution de l'espacement selon Langford [4], mais modifie considérablement la morphologie des lamelles de cémentite qui se trouvent perpendiculaire à l'axe du fil (figure 4.5) ; cette particularité morphologique des lamelles est liée à l'accommodation des déformations locales et à l'hétérogénéité de déformation entre phases. Du fait de la nature partiellement cohérente de l'interface perlitique, il est probable qu'elle participe à l'accommodation d'une partie de la déformation par des interactions dislocations/marches.

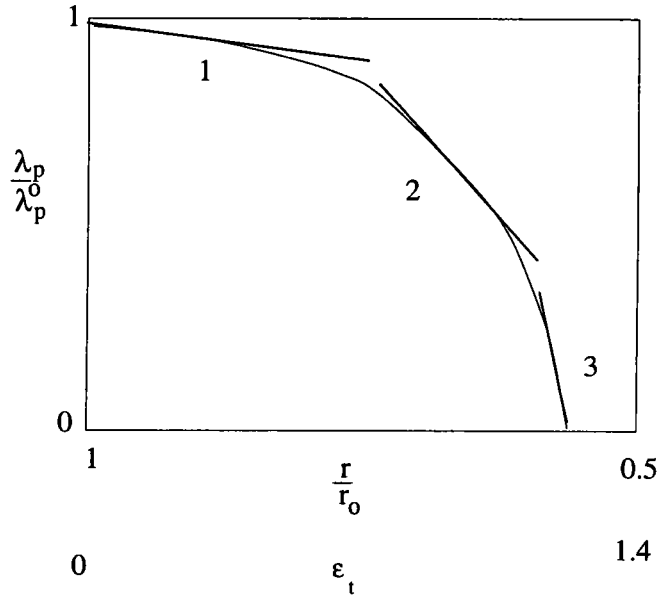


FIG. 4.4 – Evolution expérimentale de l'espace interlamellaire dans les aciers selon divers taux de tréfilage [30].

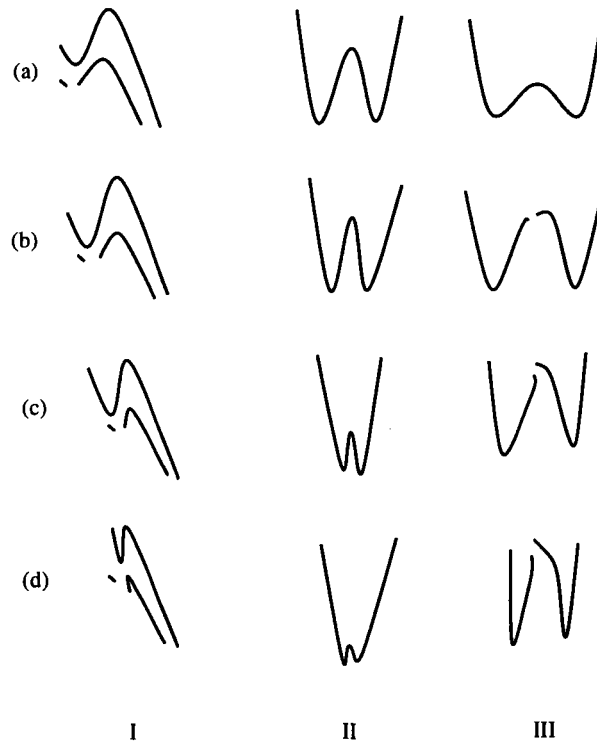


FIG. 4.5 – Comportement en déformation de lamelles de cémentite perpendiculaire à l'axe de sollicitation [31]. Trois types de morphologie sont représentés au cours du tréfilage (a-d : taux de réduction croissant).

Modélisation

Etant donné la complexité de la morphologie perlitique, on peut ne pas s'étonner que la littérature se limite la plupart du temps à établir des relations empiriques, pour un domaine de déformation donné. Si les mécanismes élémentaires de déformation sont aujourd'hui bien décrits, la nécessité de passer à l'échelle macroscopique donne lieu à une opération de moyenne délicate pour le composite lamellaire. La plupart du temps, la démarche de modélisation consiste, à partir de ces mécanismes à l'échelle locale, d'associer à une valeur moyenne de l'espacement interlamellaire (selon le principe de similitude utilisé pour le tréfilage), une contrainte moyenne, soit limite élastique du matériau, soit contrainte d'écoulement, voire contrainte à la rupture [44, 54, 6, 3]. Les tentatives ainsi produites ne permettent pas de conclure en une bonne description des phénomènes d'échelles : la simplicité d'une relation de type $\sigma = k/\lambda_p$ ne doit pas faire oublier la complexité morphologique de l'acier perlitique.

Dollar & al [61] ont tenté d'apporter une solution générale en fournissant une relation entre contrainte de traction et déformation, tout en prenant en compte la morphologie particulière de la perlite. Ils concluent à une relation du type

$$\sigma = \sigma'_o + \frac{k}{\lambda_p} + \beta \epsilon^n$$

qui en fait surestime leurs valeurs expérimentales [60].

Il semble donc que les mécanismes élémentaires de déformation de la perlite soient bien décrits, mais qu'une approche phénoménologique est insuffisante à produire une opération de moyenne suffisamment fine pour prendre en compte les différentes échelles d'hétérogénéités du matériau et prédire le comportement global du matériau.

Une approche basée sur le principe de transition d'échelle et la micromécanique des mécanismes élémentaires de déformation permettrait de choisir des opérations d'homogénéisation plus appropriées. En effet, comme les mécanismes à l'échelle des dislocations sont connus, il suffit d'opérer par moyennes successives, suffisamment riches pour garder en mémoire aussi bien la morphologie des grains monocristallins que celle du grain de perlite, ou îlot. Il y a donc trois échelles à prendre en compte :

- . celle des mécanismes élémentaires (échelle des dislocations) ;
- . celle d'un grain monocristallin de morphologie particulière (lamelle) ;
- . celle du grain de perlite, ou îlot, (grain biphasé lamellaire) ;

pour pouvoir approcher le comportement de la perlite à l'échelle globale.

Contraintes internes

Les procédés de mise en forme à froid, tel le tréfilage, engendrent tous l'apparition de contraintes résiduelles dans le matériau, c'est à dire un état de contraintes internes persistant en l'absence de tout effort extérieur appliqué. Les ordres des contraintes internes sont définis suivant que celles-ci sont homogènes (moyennées) sur le polycristal à l'échelle macroscopique (ordre I), à l'intérieur d'un grain ou d'un sous-grain à l'échelle mésoscopique (ordre II) ou à l'échelle microscopique (ordre III). Jusqu'à maintenant, les contraintes résiduelles ont reçu une classification très globale qui peut être directement interprétée dans un matériau monophasé et les trois ordres de contraintes internes restent clairement définis.

Dans le cas où le matériau contient plus d'une phase, par exemple deux phases distinctes,

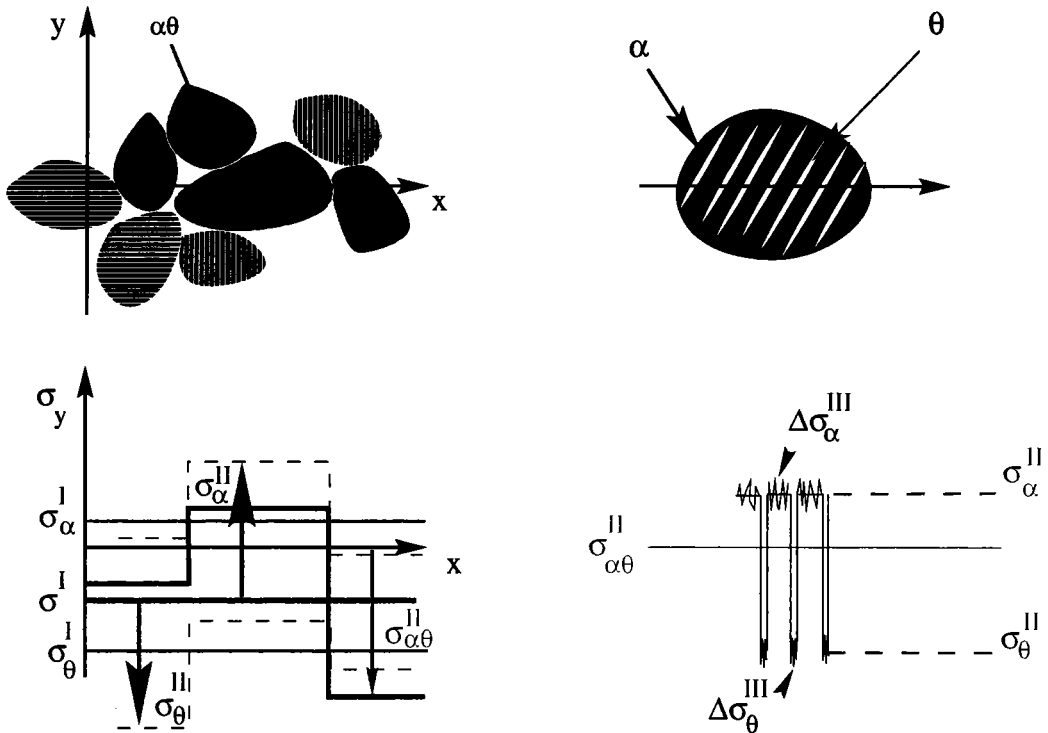


FIG. 6.1 – Description des différents ordres de contraintes internes utilisés dans le cas d'un matériau monophasé.

les définitions restent valables en prenant l'échelle de la phase comme référence dans le matériau. Belassel [76] propose alors de séparer les effets d'ordre I et les effets d'ordre II au niveau de chaque phase. Les contraintes d'ordre I et II sont composées d'une contrainte interne pseudomicroscopique, notée σ_α^I dans la ferrite et d'une contrainte pseudomicroscopique, notée $\sigma_\alpha^{II}(g)$ dans la ferrite. g traduit l'effet de l'anisotropie cristalline et de la désorientation relative des lamelles de ferrite dans un grain g ou ilot par rapport au repère de l'échantillon : $\sigma_\alpha^{II}(g)$ est alors la contrainte réelle à l'échelle microscopique.

A l'échelle macroscopique la contrainte moyenne de toutes les phases est la macro-contrainte Σ . A cette échelle, on définit un volume V -constitué d'un grand nombre de grains (ou ilots)-petit devant la taille de l'échantillon. Les deux phases α et θ sont présentes dans le volume V , avec les fractions volumiques c^α et c^θ . Les valeurs de c^α et c^θ sont égales aux fractions volumiques macroscopiques si le matériau est homogène. On définit la contrainte totale de phase σ_α^I qui est la moyenne des contraintes locales de phase $\sigma_\alpha^{II}(g)$ sur le volume V^α de phase α :

$$\sigma_\alpha^I = \frac{\int_{V^\alpha} \sigma_\alpha^{II}(g) f^\alpha(g) dV}{\int_{V^\alpha} f^\alpha(g) dV} \quad (6.1)$$

où $f^\alpha(g)$ est la distribution de l'orientation des grains dans V^α . La macrocontrainte est donnée par l'expression :

$$\Sigma = c^\alpha \sigma_\alpha^I + c^\theta \sigma_\theta^I \quad (6.2)$$

C'est la contrainte macroscopique responsable de la déformation de l'échantillon lorsqu'il est sollicité macroscopiquement.

A l'échelle microscopique, la contrainte $\sigma_\alpha^{II}(g)$ dévie de la macro-contrainte Σ . Dans la configuration déchargée, la déviation $\Delta\sigma_\alpha^{II}(g) = \sigma_\alpha^{II}(g) - \Sigma$ appelée contrainte microscopique est égale à la contrainte pseudo-microscopique. Cette micro-contrainte émerge de propriétés élastiques des deux phases. Si la contrainte dans le matériau est causé par des phénomènes purement élastiques, la micro-contrainte (ou contrainte microscopique) sera proportionnelle à la macro-contrainte, selon les modèles d'élasticité linéaire [20]. Dans ce cas, $\Delta\sigma_\alpha^{II}(g)$ est la contrainte d'interaction élastique $\Delta^e\sigma_\alpha^{II}(g)$. Une micro-contrainte peut avoir pour cause la différence d'écoulement plastique entre phases. Dans ce cas, la micro-contrainte n'est pas nécessairement proportionnelle à la macro-contrainte. Si la macro-contrainte est relaxée (après chargement), une partie de la micro-contrainte persiste. Cette contrainte rémanente d'interaction entre phases est notée $\Delta^r\sigma_\alpha^{II}(g)$. En général, la contrainte microscopique $\Delta\sigma_\alpha^{II}(g)$ de la phase α a deux composantes, le terme d'interaction élastique $\Delta^e\sigma_\alpha^{II}(g)$ et la micro-contrainte de phase $\Delta^r\sigma_\alpha^{II}(g)$:

$$\Delta\sigma_\alpha^{II}(g) = \Delta^e\sigma_\alpha^{II}(g) + \Delta^r\sigma_\alpha^{II}(g) \quad (6.3)$$

Dans une configuration déchargée, la contrainte liée aux différences de comportement élastique est nulle et $\Sigma = 0$, soit :

$$\sigma_\alpha^{II}(g) = \Delta^r\sigma_\alpha^{II}(g)$$

La micro-contrainte est le terme constant qui ne dépend pas directement de Σ . Par analogie à la contrainte pseudo-macroscopique σ_α^I , une micro-contrainte de phase totale peut être définie dans chaque phase et :

$$c^\alpha \Delta^r\sigma_\alpha^{II} + c^\theta \Delta^r\sigma_\theta^{II} = 0$$

A une échelle intermédiaire, nous définirons les contraintes mésoscopiques σ^{IIi} (ou $\sigma_{\alpha\theta}^{II}$) d'ordre II, définies à partir du comportement effectif de chaque îlot de perlite. Elles correspondent alors à une description poly-îlots de la perlite, où le champ de déformation est 'mésom-homogène' dans un îlot, hétérogène entre îlots. Les contraintes d'ordre III sont liées aux fluctuations locales du champ de contraintes, à l'échelle du cristal.

Conclusion

Déjà dans la perlite non tréfilée, la structure lamellaire possède de nombreuses imperfections comme les terminaisons de lamelles, les joints de désaccord de mailles, aussi bien que des rotations, des courbures, des ondulations et des modifications d'épaisseur de lamelles de cémentite. De plus, la structure lamellaire peut dégénérer en rubans de cémentite, lamelles perforées ou même des fragments isolés. Il est donc impossible de séparer les effets de la déformation à froid des défauts de croissance perlitique. En conséquence de la présence d'un grand nombre de types de défauts dans la structure, il est difficile de conclure sur la déformation de la cémentite, la rotation des colonies, l'initiation et la croissance de fissures. Il est nécessaire de suivre le comportement de lamelles individuelles ou des îlots de perlite [54]. Cette conclusion est confortée par l'hypothèse de décorrélation des îlots. On décrit donc la perlite lamellaire comme un matériau composé d'un grand nombre d'îlots, chaque îlot étant constitué d'un ensemble de lamelles alternées parallèles de ferrite et de cémentite.

Si on considère la structure lamellaire (l'îlot) comme un ensemble périodique d'arrangements plans de dislocations, on peut définir une interface interlamellaire, lieu préférentiel de stockage des dislocations et deux milieux homogènes adjacents, soumis au backstress de la sous-structure.

L'homogénéité de chaque lamelle de perlite est en accord avec les modes de déformation de l'acier perlitique industriel. Les fluctuations locales du champ de déformation réel dans le volume des phases sont négligeables devant l'hétérogénéité du champ de déformation à l'interface[56]. L'hypothèse d'homogénéité de chaque constituant est donc ici relative. Le principal effet recherché est celui de l'interface perlitique : le glissement plastique dans chaque phase est alors lié à un événement de type germination et stockage de dislocations à l'interface et suit un formalisme de type (3.1). Pour définir la compatibilité de l'interface, on choisit le cas le plus proche du réel, selon Louchet [24], correspondant à une interface cohérente, dont on connaît les relations d'orientation entre phases. L'effet mésoscopique de désorientation du plan d'habitat apparent par rapport au plan d'habitat atomique est ici purement géométrique [3, 4].

Le cadre ainsi défini permet d'approcher le comportement des phases perlitiques dans celui de la mécanique des milieux continus.

A l'échelle de l'îlot, la présence d'un grand nombre d'interfaces caractérise l'hétérogénéité de la déformation (interlamellaire). Deux échelles sont à prendre en compte : celle de la lamelle, où la déformation est supposée homogène relativement au saut de déformation à l'interface, et

celle de l'îlot, formé d'un ensemble hétérogène de lamelles.

A une échelle encore supérieure, chaque îlot adopte un comportement plus ou moins ductile en fonction de l'orientation des lamelles, et le matériau perlitique peut être vu comme un composite poly-îlots.

Le facteur essentiel de la structure est la géométrie lamellaire : deux paramètres entrent en jeu, l'espacement entre lamelles (e.i.) et l'orientation des lamelles (plan des lamelles ou plan d'habitat apparent) par rapport à la sollicitation. Le premier paramètre permet de définir les mécanismes élémentaires de déformation, le deuxième, la contribution géométrique de l'îlot à la résistance à la sollicitation.

Les nodules de la perlite se forment de façon aléatoire ; il est donc difficile de contrôler l'orientation des lamelles lors du patentage (par exemple, par un gradient thermique imposé, ou un champ magnétique approprié...). Pour optimiser la résistance de l'acier, la structure à obtenir correspond à une géométrie très fine (espacement entre phases). Le processus de formation d'un tel matériau est fortement lié à la composition de l'acier perlitique. Les éléments d'alliage sont notamment susceptibles de modifier la microstructure.

Le cadre de la thèse -celui du recyclage des aciers- donne la possibilité d'étudier l'un de ces facteurs. Issu de la filière électrique, le cuivre est un des éléments résiduels déterminants dans le recyclage. Connu par son caractère trempant, il est susceptible d'apporter des modifications de la structure perlitique pour quelques dixièmes de pour-cent. L'avantage d'un tel cas d'étude est de pouvoir à la fois cerner les effets indirects du cuivre -ceux générés par la modification morphologique (e.i.) de la perlite lors de sa formation- et les effets directs sur les propriétés mécaniques (type durcissement par précipitation par exemple). Nous verrons dans ce cas d'application que les effets du cuivre ne sont pas triviaux et apportent des modifications significatives de la microstructure et donc des propriétés mécaniques, que nous tenterons d'appréhender.

Le cuivre dans les fils d'acier perlitique

Introduction

Dans le contexte du recyclage des aciers, le cuivre se trouve dans les circuits électriques des appareils ménagers ou automobiles, souvent inséparable du fer doux. Il n'est pas possible de supprimer totalement le cuivre résiduel présent dans l'acier. Il est probable que le taux de cuivre résiduel atteignent les valeurs de l'ordre de 0.5% en poids de cuivre, après cinq années de recyclage.

Pour obtenir une meilleure tréfilabilité, il est important de bien contrôler la formation de la perlite au cours du laminage du bloom. Du fait du caractère trempant du cuivre (le cuivre stabilise l'austénite), il est possible que des phases mineures se forment comme par exemple un réseau de phase proeutectoïde aux joints de grain voire des lattes de martensite ! La perlite peut aussi dégénérer sous la forme de courtes lamelles de cémentite, noyées dans une matrice de ferrite. Le processus de transformation doit être adapté à la composition chimique de l'acier.

La nécessité de mettre en forme les fils après le tréfilage demande une bonne connaissance des propriétés des fils en sortie de tréfilage. L'aptitude de l'acier perlitique à être tréfilé est liée à la limite de tréfilage, qui varie avec l'enrichissement de l'acier en cuivre. L'évolution du comportement de l'acier en traction, avant tréfilage et après tréfilage est caractérisée pour trois compositions étudiées (0%Cu, 0.33%Cu, 0.77%Cu).

On distinguera deux effets :

- . l'effet direct ou effet durcissant du cuivre sur la résistance mécanique du fil (par exemple, durcissement par solution solide, par précipitation...);
- . l'effet indirect ou effet microstructural du cuivre sur la morphologie de la perlite, qui engendre alors des modifications indirectes du comportement mécanique de l'acier étudié.

Cette distinction des effets est arbitraire mais semble bien refléter les phénomènes d'échelles mis en évidence dans la première partie de ce mémoire.

Par exemple, l'effet durcissant du cuivre en solution solide est lié aux mécanismes sous-jacents de mouvement et de stockage des défauts dans les lamelles.

Un effet sur la microstructure peut être lié à la distribution ou l'organisation des interfaces : l'épaisseur des lamelles (modifiée essentiellement par des éléments carburigènes comme le chrome, non le cuivre), l'espacement interlamellaire, la continuité des lamelles etc. Il s'agit là bien de l'échelle de l'îlot dont les propriétés morphologiques et géométriques sont intrinsèques à la structure perlitique et ont des conséquences à l'échelle globale du matériau.

Formation de la perlite

La recherche d'une perlite fine, obtenue jusqu'alors par un traitement de patentage¹², dépend des conditions de refroidissement dans la zone de transformation austénite-perlite. Pour permettre la formation d'une structure perlitique fine très dure et très ductile, sans traitement thermique, il est nécessaire, dans un premier temps, de caractériser le domaine composition-température de transformation perlitique pour lequel la microstructure est effectivement perlitique lamellaire. On étudie ensuite la morphologie de la microstructure obtenue avant tréfilage (essentiellement, l'e.i. et la régularité), dans le cas du laminage au train à fil. Il est possible que le cuivre affine la microstructure (de part son caractère trempant), mais nous verrons que l'effet réel est plus complexe qu'une simple réduction de l'e.i. C'est pourquoi, nous caractérisons aussi l'état de précipitation du cuivre dans la perlite et sa partition dans les deux constituants perlitiques.

9.1 Composition de l'acier

Trois compositions d'une nuance plus ou moins enrichie en cuivre sont étudiées.

Elément	C	Mn	Si	P	Cr	Cu	Al	N	S
Nuance 1	0.82	0.77	0.26	0.01	0.27	0.004	0.05	0.006	0.01
Nuance 2	0.81	0.76	0.26	0.01	0.26	0.33	0.05	0.007	0.009
Nuance 3	0.82	0.79	0.27	0.012	0.27	0.77	0.05	0.009	0.011

TAB. 9.1 – *Compositions de la nuance de l'acier dont deux enrichis en cuivre.*

9.2 Etude thermodynamique et cinétique de la transformation

9.2.1 Thermodynamique - Simulations

Les modifications de la composition chimique de l'acier sont susceptibles d'influencer la transformation perlitique. Pour prévoir les effets du cuivre sur la température théorique de transformation nous avons procédé, avec P. Maugis de l'Irsid, à des simulations Thermo-Calc¹³ susceptibles

¹²Le patentage consiste en une austénitisation de l'acier brut, qui est ensuite refroidi à une vitesse donnée lors du laminage de l'acier au train à fil

¹³Irsid

de donner des indications sur les modifications des équilibres termochimiques pour la transformation perlitique. Le diagramme de phase utilisé est représenté par un diagramme pseudo-binaire, qui tient compte de la partition des éléments d'alliage (ou résiduels) au cours de la transformation et est une coupe à une composition donnée en élément d'alliage, du diagramme ternaire Fe-C-Cu. Le plateau eutectoïde du diagramme de phase à l'équilibre est alors déplacé du fait de la présence d'éléments d'alliage.

Description

Thermo-Calc est un logiciel de simulation des effets des éléments d'alliage sur les équilibres termochimiques des alliages. Le modèle est établi selon les principes de partition des éléments d'alliage dans les différentes phases, fondé sur les données thermodynamiques de la littérature [95, 94]. L'effet du cuivre sur la transformation eutectoïde est représenté par les projections isothermes de l'équilibre de l'austénite avec les phases présentes dans la perlite, la ferrite et la cémentite (figure 9.1) [93].

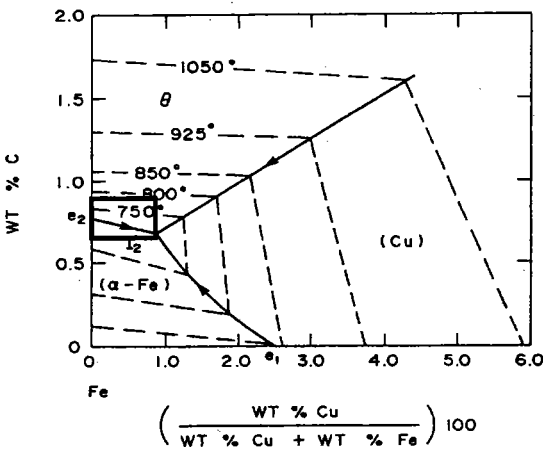


FIG. 9.1 – Projections polythermes du domaine d'équilibre de l'austénite pour le système Fe – Fe₃C – Cu [93].

Cette représentation permet déjà de conclure que pour un acier ternaire Fe-C-Cu le cuivre précipite à partir de 1%Cu en poids dans les deux phases de la perlite.

Sur la ligne d'équilibre entre α et θ , le cuivre a tendance à déplacer le point eutectoïde vers les plus faibles compositions en carbone, donnant ainsi à l'acier eutectoïde enrichi en cuivre un caractère légèrement hypereutectoïde.

Effet de Cu-Mn

Les simulations Thermo-Calc montrent qu'en l'absence d'autre élément d'alliage, le cuivre a un effet négligeable sur la température de transformation. Associé au manganèse, on note une variation de l'ordre de 10°C de la température de transformation avec le cuivre, la transformation ayant lieu à une température plus basse, et pour une nuance en carbone plus faible (voir figure 9.2). Cette simulation confirme les résultats obtenus par Le May [93].

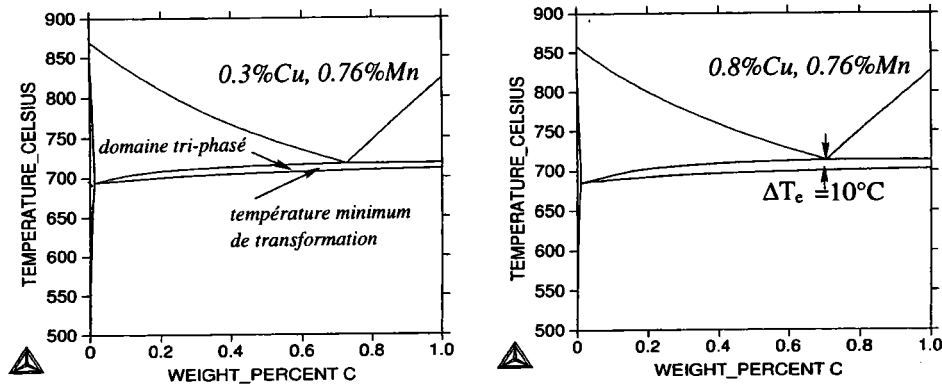


FIG. 9.2 – Résultats des simulations Thermocalc, dans le cas d'un enrichissement faible en cuivre, et dans le cas d'un enrichissement plus important. La variation du domaine de température eutectoïde est liée à la prise en compte de la partition du cuivre (et du manganèse) dans les phases produites.

9.2.2 Transformation isotherme

Le traitement thermique subi par les échantillons de dilatométrie est indiqué schématiquement dans la figure 9.3 .

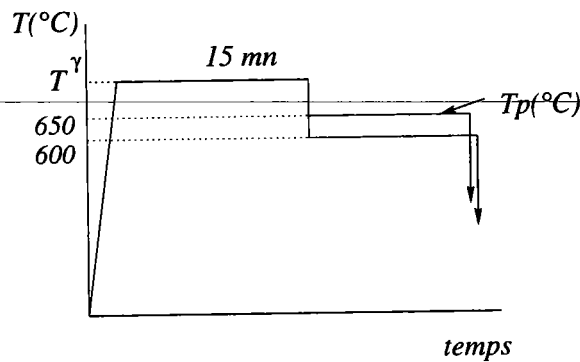


FIG. 9.3 – Traitement thermique appliqué aux échantillons dilatométriques des nuances 1, 2 et 3. Après une montée en chauffage à 10°C/s , un maintien d'un quart d'heure à $T_\gamma = 790^\circ\text{C}$, la transformation perlitique a lieu sur l'isotherme T_p . Deux températures sont étudiées : 600°C et 650°C .

Les cinétiques de transformation isotherme perlitique sont obtenues, pour les deux températures 600°C et 650°C . Elles sont représentées sur la figure 9.4. On note un épaulement sur la courbe décrivant la cinétique de transformation de la nuance 3 : ceci indique une hétérogénéité de la cinétique de transformation. La cinétique de transformation est ralentie considérablement à 650°C avec l'enrichissement en cuivre.

Il semble qu'à une température de transformation plus élevée, l'influence du cuivre soit plus importante. L'épaulement caractéristique de l'hétérogénéité de la transformation est largement visible dans ce cas sur les deux courbes correspondant aux compositions enrichies en cuivre.

La naissance de cette hétérogénéité apparaît déjà sur la nuance sans cuivre de l'acier lors de la transformation isotherme à 650°C .

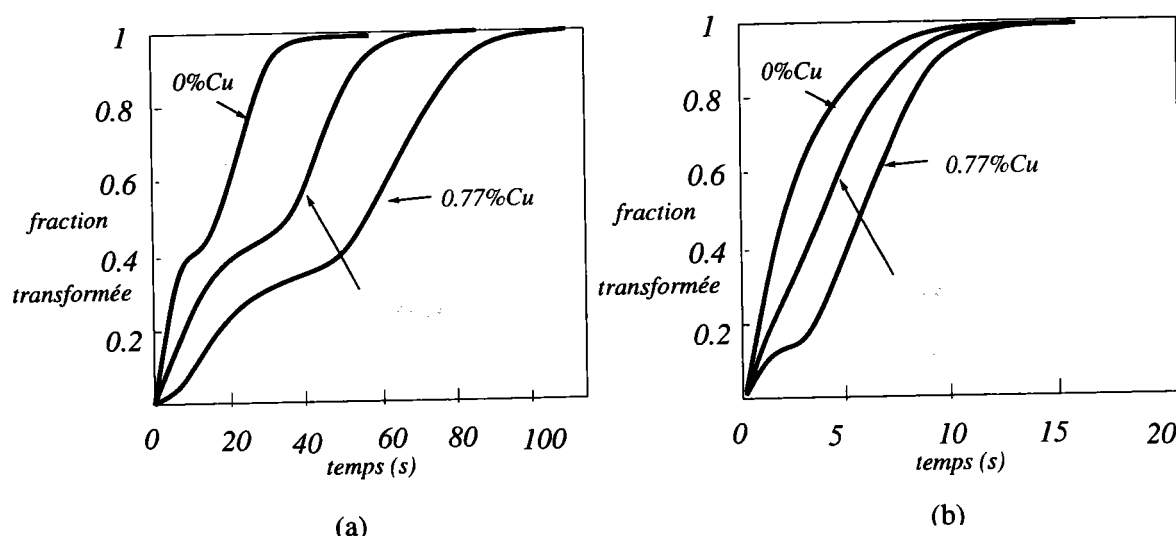


FIG. 9.4 – Evolution de la fraction d'austénite transformée au cours du temps, à la température (a) 650°C et (b) 600°C . La fraction transformée est calculée à partir de la variation de longueur de l'éprouvette de dilatométrie.

9.3 Conditions industrielles

Pour obtenir une taille de grain très fine de l'austénite, la température d'austénitisation A_c ou T_γ est déterminée par un premier refroidissement naturel (à l'air libre). On détermine alors la température de maintien qui est placée à une température légèrement supérieure à A_c , soit 790°C .

On observe une modification de la vitesse critique de trempe en fonction du taux de cuivre résiduel dans l'acier (figure 9.6). Pour la nuance 2, faiblement enrichie en cuivre, la vitesse critique de trempe est diminuée à environ 30°C/s , alors que dans le cas de la nuance 3, fortement enrichie en cuivre, la vitesse critique de trempe est très faible, de l'ordre de 5°C/s .

Pour adapter le procédé de laminage au train à fil aux nuances qu'on désire étudier, il est nécessaire de diminuer la vitesse de refroidissement au maximum ('tous ventilos éteints'). La cinétique de transformation de la perlite est alors accessible indirectement par le logiciel Eole¹⁴, selon l'évolution de la température appliquée au cours du passage du fil au train, et selon la composition de l'acier laminé. La cinétique estimée est représentée sur la figure 9.7, ainsi qu'une mesure de la vitesse moyenne de refroidissement à laquelle la transformation perlitique démarre, qui est effectivement inférieure à 5°C/s .

¹⁴IRSID

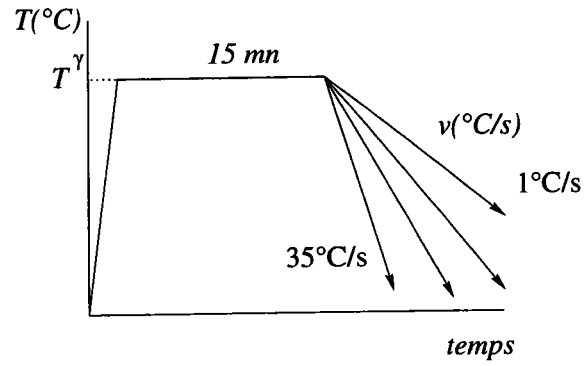


FIG. 9.5 – Traitement thermique appliqué aux échantillons de dilatométrie, pour différentes vitesses de refroidissement. Le gaz utilisé est soit de l'hélium, soit de l'azote.

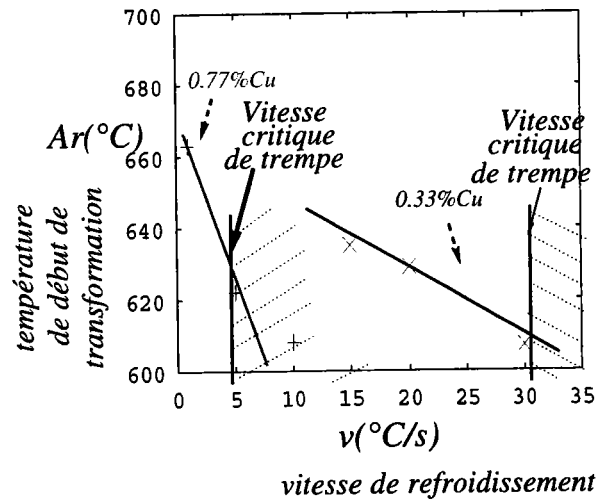


FIG. 9.6 – Evolution des températures de début de transformation avec le taux de cuivre- Vitesse critique de trempe (présence de martensite).

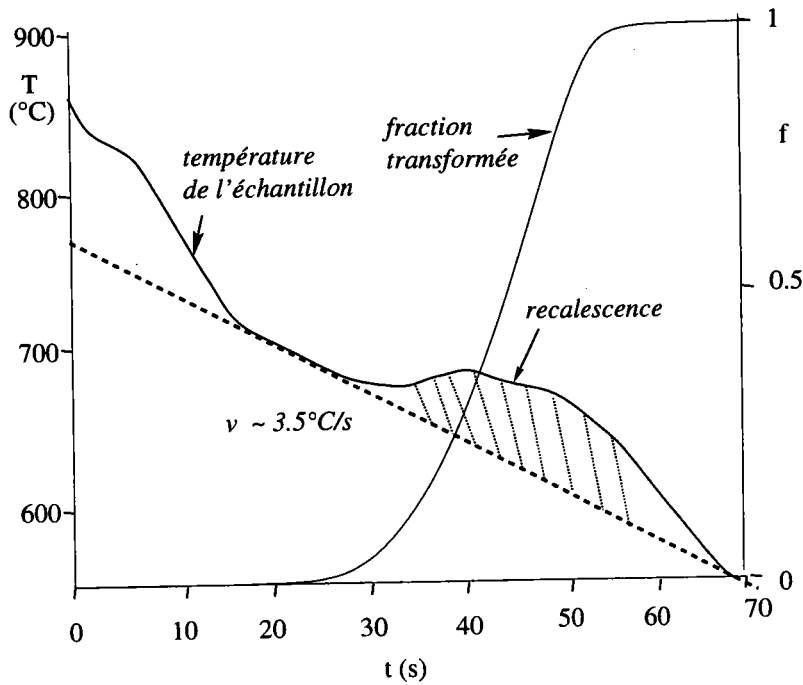


FIG. 9.7 – Evolution de la température au cours du laminage de l'acier au train à fil. Estimation de la cinétique de transformation par simulation Eole, dans le cas de la nuance 1.

Le choix de ces conditions industrielles de transformation de l'acier n'est pas sans conséquences. En effet, en diminuant considérablement la vitesse de refroidissement, la température de début de transformation de l'acier augmente (voir figure 9.7). Si la perlite industrielle est refroidie à 35°C/s , sa température de début de transformation est probablement proche de 600°C/s (voir figure 9.6), température à laquelle l'hétérogénéité de la transformation sur la nuance 1 n'est pas visible (voir figure 9.4(a)). Si par contre, la température de début de transformation augmente (du fait de la faible vitesse de refroidissement), l'hétérogénéité semble marquée sur la nuance sans cuivre (voir figure 9.4(b)). Il semble donc que l'adaptation du processus de transformation à la nuance 3 génère une hétérogénéité de la transformation perlitique de la nuance sans cuivre (voir les isothermes de la nuance 1). Cet effet est évidemment accentué par la présence du cuivre.

9.4 Conclusion

La caractérisation de la transformation perlitique pour les nuances 1,2 et 3, sur deux isothermes, a permis de mettre en évidence l'influence de la température sur la cinétique de transformation : à 600°C , seule la nuance 3 présente un épaulement, alors qu'à 650°C , les deux nuances enrichies en résiduel (2 et 3) montre cette caractéristique. Le cuivre ralentit la transformation et la rend hétérogène. De plus, le fait de réduire considérablement la vitesse de refroidissement lors du processus industriel de laminage a pour conséquence de modifier la température de début de transformation de la perlite et rend la nuance de référence (sans cuivre) hétérogène.

Des observations et simulations Thermo-Calc présentées, on peut conclure que l'enrichissement en cuivre provoque une diminution de la température eutectoïde. On peut s'attendre à ce que l'effet du cuivre soit de diminuer la taille de la microstructure (l'espacement interlamellaire).

Cet effet devient significatif lors du refroidissement continu, du fait du caractère trempant du cuivre (le cuivre stabilise l'austénite).

Si, d'autre part, on note que la transformation perlitique est ralentie par l'enrichissement en résiduel, on peut s'attendre à une distribution plus large de la morphologie lamellaire. Cette conclusion est en accord avec le ralentissement significatif de la cinétique de transformation et donc de la vitesse du front de croissance (on suppose que la densité des sites de germination est identique quel que soit le taux de cuivre). On peut donc s'attendre à ce que l'e.i. soit augmenté de façon significative pour les nuances 2 et 3.

La compétition des deux phénomènes antagonistes (caractère trempant du cuivre et ralentissement de la transformation) ne permet pas de conclure définitivement sur les modifications de la microstructure que génère la présence du cuivre résiduel. De plus, l'hétérogénéité notable de la transformation qui apparaît à 650°C pour la nuance 1 (référence) se retrouve probablement lors de la transformation de l'acier en conditions industrielles. C'est pourquoi il est nécessaire de préciser par microscopie électronique à balayage les caractéristiques de la morphologie de la perlite obtenue.

9.5 Morphologie des constituants

Le seul paramètre étudié ici est l'e.i. apparent λ_a . Pour caractériser l'e.i. apparent d'une perlite, il est nécessaire de trouver un moyen de le mesurer. En général, on prend comme valeur de l'e.i. apparent la valeur moyenne des e.i. apparents mesurés sur un nombre suffisant d'images de la microstructure, prises au hasard. Etant donné la finesse de la microstructure obtenue, les images sont acquises au microscope électronique à balayage de l'Irsid (Jeol) à un grandissement $\times 10000$. Les mesures sont effectuées sur un ensemble de 15 images de chaque échantillon. Certaines sont susceptibles d'être analysées automatiquement par le logiciel Péricolor de l'Irsid (figure 9.8), d'autres, pour lesquelles la microstructure est trop fine ou trop perturbée, sont analysés à la main.

Les premières observations au MEB permettent de noter que le cuivre semble rendre la microstructure moins régulière, et plus fine.

9.5.1 Espacement interlamellaire - Analyse d'images (Péricolor¹⁵)

L'évolution de l'espacement interlamellaire apparent mesuré est donnée en fonction du taux de cuivre et pour les deux processus de transformation (isotherme et refroidissement continu, figure 9.9). On observe ici, en corrélation avec les observations précédentes, que l'e.i. apparent moyen mesuré augmente avec le taux de résiduel pour une transformation isotherme à 650°C . Dans le cas d'une température de transformation isotherme à 600°C , on n'observe pas de modification significative de l'espacement interlamellaire [?].

La courbe correspondant au refroidissement continu couple les deux effets antagonistes cités précédemment : le cuivre est susceptible d'augmenter localement l'e.i. (ralentir la vitesse du front de croissance) et le caractère trempant du résiduel diminue la température de début de transformation, donc l'e.i. Il apparaît alors logique d'obtenir une structure plus fine, mais aussi plus

¹⁵Irsid

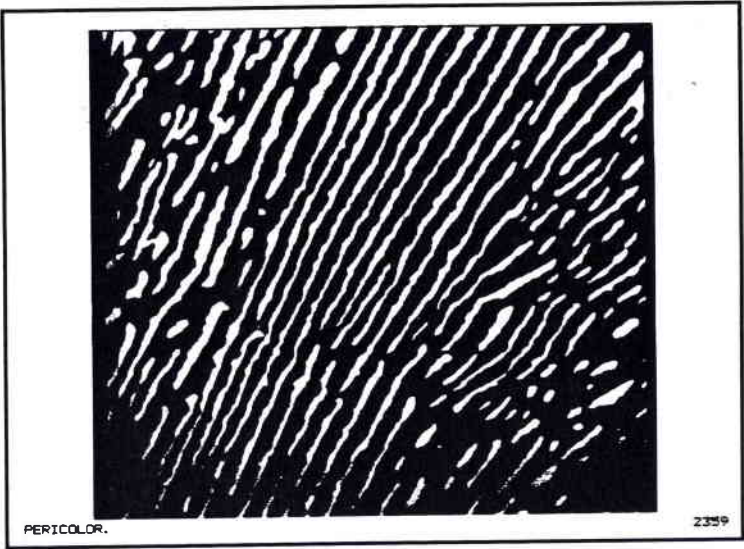


FIG. 9.8 – Image obtenue par seuillage de l'image de la microstructure acquise au meb (X10000). Séparant ainsi les lamelles par contraste, il est possible d'obtenir la distribution des espacements interlamellaires apparents.

désordonnée de la perlite enrichie au cuivre. Enfin, ces modifications sont surtout significatives pour un taux de résiduel proche de 0.77%Cu.

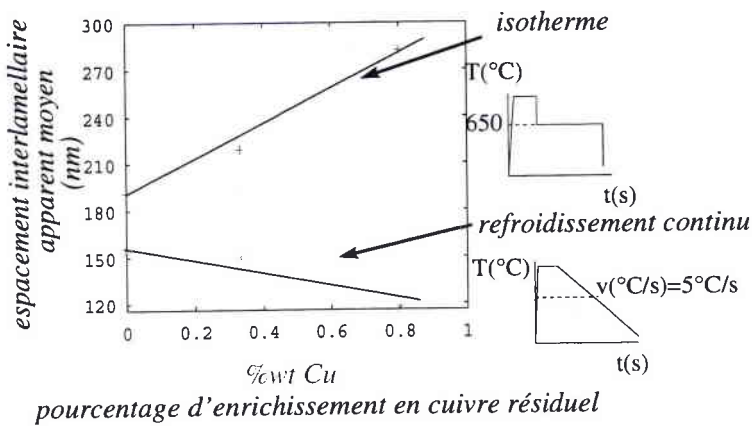


FIG. 9.9 – Résultats des mesures d'espacement interlamellaire apparent moyen. La courbe supérieure correspond à un processus de transformation isotherme, la courbe inférieure, au processus industriel de refroidissement continu.

9.5.2 Régularité

Pour caractériser la régularité de la perlite, plusieurs méthodes d'analyse d'images existent. Notons qu'en général, la perlite formée (sans ou avec cuivre) présente des zones très fines lamellaires, et des zones dégénérées (voir figure 9.10) où les lamelles de cémentites sont fragmentées : ces observations sont en accord avec l'hétérogénéité caractérisée de la transformation.

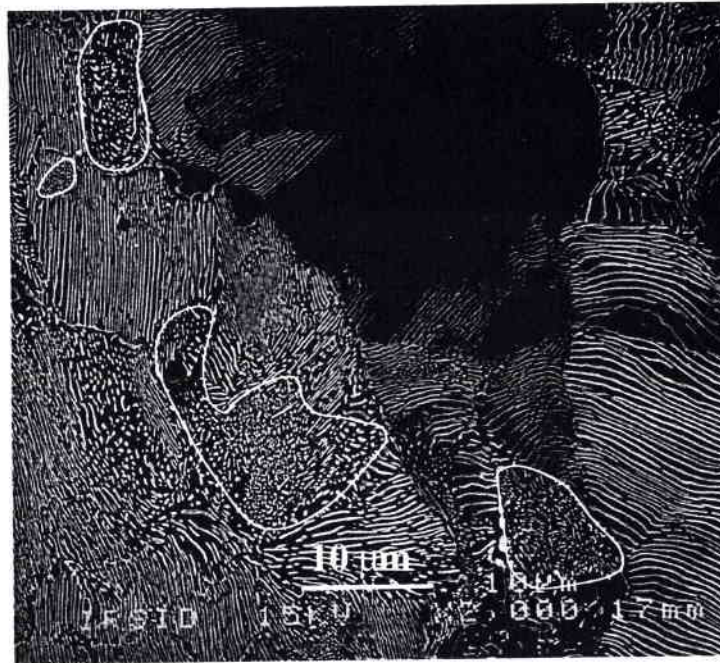


FIG. 9.10 – Mise en évidence de zones significaitves de perlite dégénérées dans le volume de l'acier : la perlite formée est hétérogène. La nuance 1 est transformée selon une isotherme à 650°C .

La perlite enrichie en cuivre est plus irrégulière [74], avec des lamelles plus courtes (figures 9.11 à 9.13). Cette observation est vraie pour la nuance 3 (0.77%Cu), mais il semble qu'à un taux massique inférieur à 0.33%Cu (nuance 2), l'effet ne soit pas très marqué.

9.6 Conclusion

L'évolution de la microstructure avec l'enrichissement en cuivre n'est pas triviale. Si le cuivre est susceptible de diminuer la vitesse du front de croissance perlitique dans l'austénite, le caractère trempant du cuivre devient prédominant dans le procédé industriel de laminage du fil. On observe d'ailleurs une diminution significative de l'e.i. apparent moyen mesuré pour la nuance à 0.77%Cu. Toutefois, cet effet ne doit pas cacher l'hétérogénéité de la perlite formée pour la nuance de référence, qui est croissante avec l'enrichissement en cuivre (en accord avec Tashiro & al. [74]).

L'effet du recyclage sur la transformation et la morphologie perlitique est double : du fait de procédé de transformation (refroidissement continu), le caractère trempant du cuivre à tendance à réduire globalement l'e.i. apparent ; du fait du ralentissement de la transformation perlitique, on peut s'attendre à une irrégularité plus grande de la perlite avec l'enrichissement en cuivre. Le couplage de ces effets résulte donc en un affinement significatif de l'e.i. pour 0.77%Cu, ainsi qu'une distribution plus large des e.i. réels et des longueurs de lamelles.

Le recyclage de l'acier serait alors tolérable pour cette nuance d'acier, jusqu'à un taux d'au moins 0.33%Cu. Il est toutefois nécessaire de caractériser le taux d'inhomogénéité de la perlite pour une vitesse de refroidissement industrielle (30°C/s). Ici, la baisse considérable de la vitesse

de refroidissement lors du laminage du fil est probablement l'effet le plus néfaste sur la microstructure de la perlite de référence.

Le procédé de laminage au train à fil pourrait alors être adapté sans trop de modification à des compositions intermédiaires entre la nuance 1 et la nuance 2. Par contre, pour la nuance 3, la faible vitesse de refroidissement requise et les états de surface des fils est limitante et demande une modification significative de la composition de l'alliage pour l'adapter au train à fil industriel.

Ces changements de la microstructure sont susceptibles de modifier le comportement du matériau (limite d'élasticité, écrouissage etc...), ce que nous allons caractériser dans le chapitre suivant.

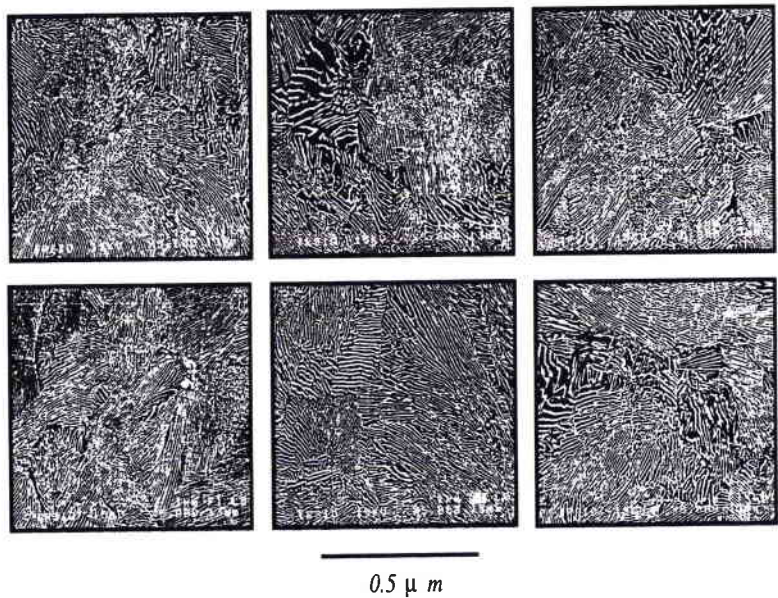


FIG. 9.11 – Clichés obtenus en microscopie électronique à balayage ($\times 5000$) de la perlite correspondant à la nuance 1.

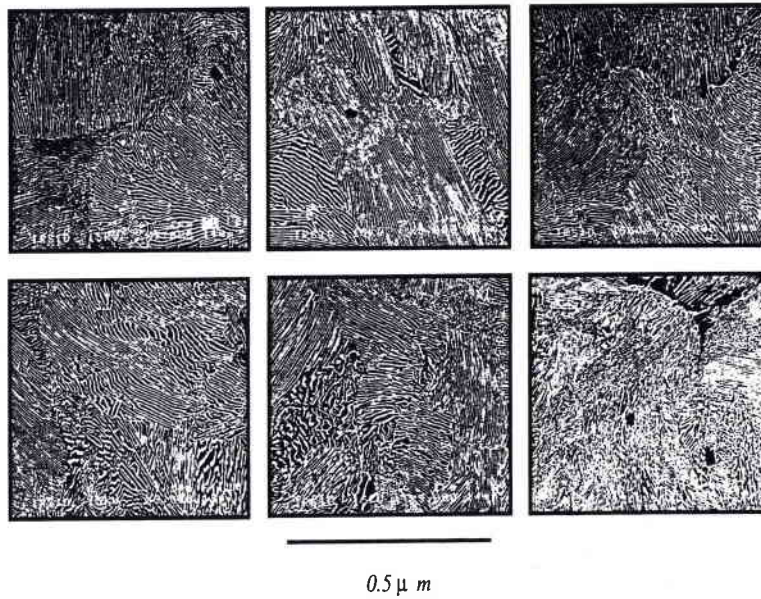


FIG. 9.12 – Clichés obtenus en microscopie électronique à balayage ($\times 5000$) de la perlite correspondant à la nuance 2.

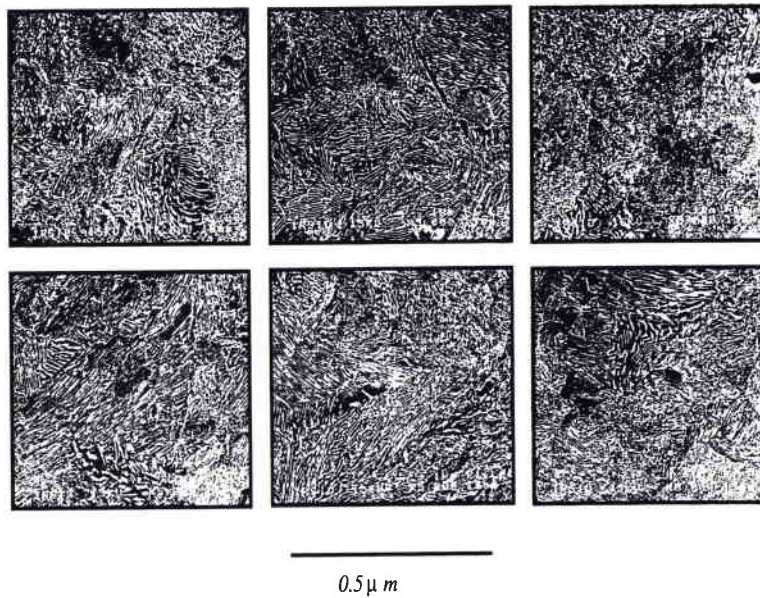


FIG. 9.13 – Clichés obtenus en microscopie électronique à balayage ($\times 5000$) de la perlite correspondant à la nuance 3.

Déformation de la perlite

Pour caractériser l'effet du cuivre sur la déformation et la tréfilabilité de la perlite, on réalise des essais de traction sur les fils patentés puis tréfilés. L'analyse des résultats obtenus permet de distinguer deux effets du cuivre, celui indirect, caractérisé précédemment sur la morphologie, et celui direct, lié à l'état de précipitation du cuivre, que nous caractériserons dans le chapitre suivant.

10.1 Traction des fils non tréfilés

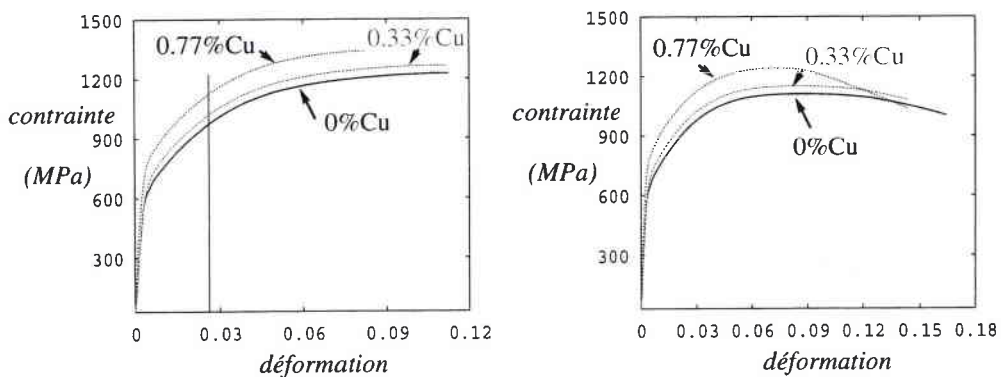


FIG. 10.1 – Courbes rationnelles (figure de gauche) et conventionnelles (figure de droite) de traction des fils d'acier patentés des nuances 1, 2 et 3. La courbe supérieure correspond à la nuance la plus enrichie en cuivre, la courbe inférieure à la nuance sans cuivre.

Les résultats d'essais de traction des fils patentés sont représentés sur la figure 10.1 (on effectuera les calculs sur les courbes rationnelles). De façon générale, on peut noter que l'enrichissement en cuivre augmente la résistance du fil non tréfilé en traction : d'environ 60 MPa à 0.33%Cu, et de plus de 130 MPa à 0.77%Cu. Ce durcissement du matériau est supérieur au durcissement par solution solide provoqué par la présence du cuivre (en général, 60MPa/%Cu en solution solide dans la ferrite).

La limite d'élasticité varie d'une nuance à l'autre entre 650 et 800 MPa. La nuance la plus

enrichie en cuivre 3 présente une microplasticté différente, probablement liée aux modifications morphologiques de la perlite, dues à la présence du cuivre. La forme de la courbe de traction est arrondie, toutefois, un premier domaine élastoplastique présente un fort écrouissage (jusqu'à environ 3% de déformation). Les trois essais forment un faisceau de courbes parallèles dès la sortie du domaine microplastique, ce qui nous permet de conclure que le cuivre n'a pas d'effet visible (macroscopique) sur l'écrouissage en traction de la perlite.

L'interprétation de ces résultats est représentée sur la figure 10.2. On trouve ici un effet moyen du cuivre sur la résistance du fil qui correspond à un gain d'environ 200MPa par pourcentage de cuivre. Toutefois, ce gain de résistance ne doit pas cacher la perte de ductilité observée

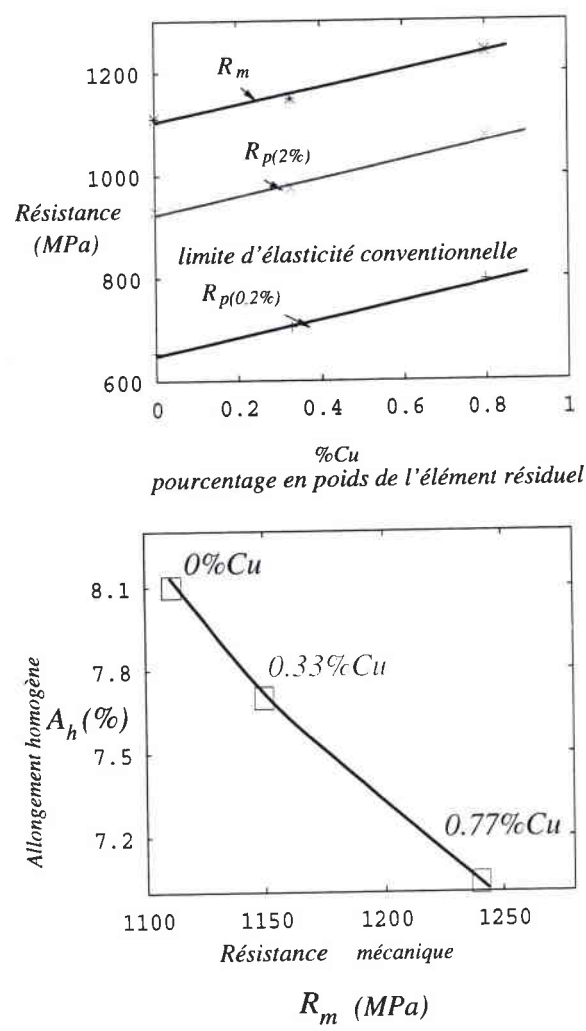


FIG. 10.2 – Evolution des caractéristiques mécaniques de traction (résistance mécanique, limite d'élasticité conventionnelle, allongement homogène (ou réparti)) en fonction de l'enrichissement en élément résiduel Cu.

lors de ces essais (voir figure 10.2). En effet, l'allongement homogène (qui correspond à l'allongement maximum associé à une déformation macroscopique homogène du fil) est diminué de façon significative avec l'enrichissement en cuivre : on observe une perte d'environ 1.3% de l'allonge-

ment homogène par pourcentage de cuivre.

On peut conclure de ces diverses observations qu'un enrichissement en résiduel cuivre, correspondant à quelques années de recyclage contrôlé des ferrailles (limitation du taux de Cu à la nuance 2 environ, soit 0.33%Cu) améliore la résistance du fil (d'environ 60 MPa, soit un gain relatif de 6%), mais diminue l'allongement homogène (environ 0.5%, soit une perte relative de 6%). Si on tient compte, pour cette nuance, de l'effet durcissant par solution solide du cuivre, la contribution à la résistance mécanique est alors un gain de l'ordre de $60 \text{ MPa} \cdot 0.33 = 20 \text{ MPa}$: c'est l'effet direct du cuivre sur la résistance du fil.

Si maintenant on prend en compte les modifications morphologiques de la perlite, liées au procédé, soit l'effet indirect du cuivre (limité ici à celui de l'espacement interlamellaire), il est possible d'estimer la contribution à la résistance mécanique due à l'affinement de la microstructure : selon la loi de Hall-Petch :

$$R_m \propto \frac{k^{H.P.}}{\sqrt{\lambda_p}}$$

avec $k=425 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\mu\text{m}}$ [6], l'effet indirect du cuivre pour la nuance 2 est de l'ordre de 40 MPa. Il est donc possible d'analyser le gain de résistance comme la somme des contributions directes et indirectes du cuivre sur la microstructure et le comportement de la perlite.

10.2 Traction des fils tréfilés/Courbes d'écrouissage

Pour caractériser l'aptitude d'un fil à être mis en forme, on procède en général, dans le cas du tréfilage, à des essais de traction après tréfilage. Les résultats présentés sont des tests mécaniques réalisés au CREAS, sur 5 éprouvettes de chaque nuance, pour une déformation de tréfilage donnée. La figure 10.3 indique l'évolution de la limite d'élasticité conventionnelle et la résistance mécanique des fils perlitiques en traction, après plusieurs passes au tréfilage.

On observe une amélioration de la résistance mécanique du fil avec l'enrichissement en cuivre. La résistance mécanique du fil sans cuivre (nuance 1) est de l'ordre du GPa, et l'effet du cuivre mesuré est de l'ordre de 50 MPa à 150 MPa, soit faible sur l'écrouissage par tréfilage. La limite de tréfilage correspond à la onzième passe en tréfilage (réduction de 20% à chaque passe), pour laquelle le fil le plus enrichi en cuivre délamine.

La ductilité des fils obtenue après tréfilage est indiquée sur la figure 10.4. Deux paramètres sont pris en compte : la striction à la rupture, notée Z telle que :

$$Z = \frac{S_o - S_r}{S_o}$$

où S_o est la section initiale du fil et S_r la section du fil à la rupture après l'essai de traction. Le deuxième paramètre est l'allongement homogène, défini précédemment. L'allongement homogène diminue avec le taux de tréfilage. Cet effet est lié au durcissement du matériau généré par la mise en forme. Le cuivre a peu d'effet sur ce paramètre. La ductilité (striction à la rupture) du fil est améliorée de façon surprenante pour la nuance 2, dans un domaine de déformation en tréfilage limité, $0 < \epsilon_t < 1.5$, avec un domaine de résistance mécanique allant de 1.3 à 1.8 GPa. Dans le cas du fil enrichi à 0.33%, il existe donc un domaine de déformation en tréfilage pour lequel la ductilité est sensiblement meilleure que pour le fil sans cuivre. Le cuivre à hauteur de 0.33%Cu

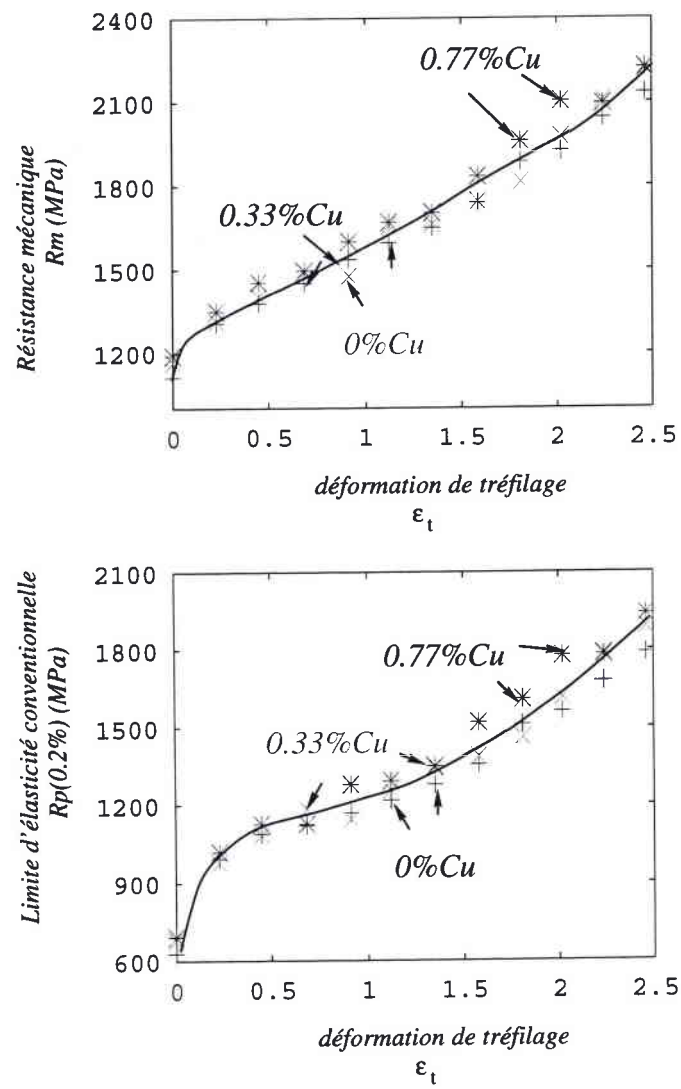


FIG. 10.3 – Evolution des caractéristiques mécaniques de traction (résistance mécanique, limite d'élasticité conventionnelle) en fonction de l'enrichissement en élément résiduel Cu, après plusieurs passes au tréfilage.

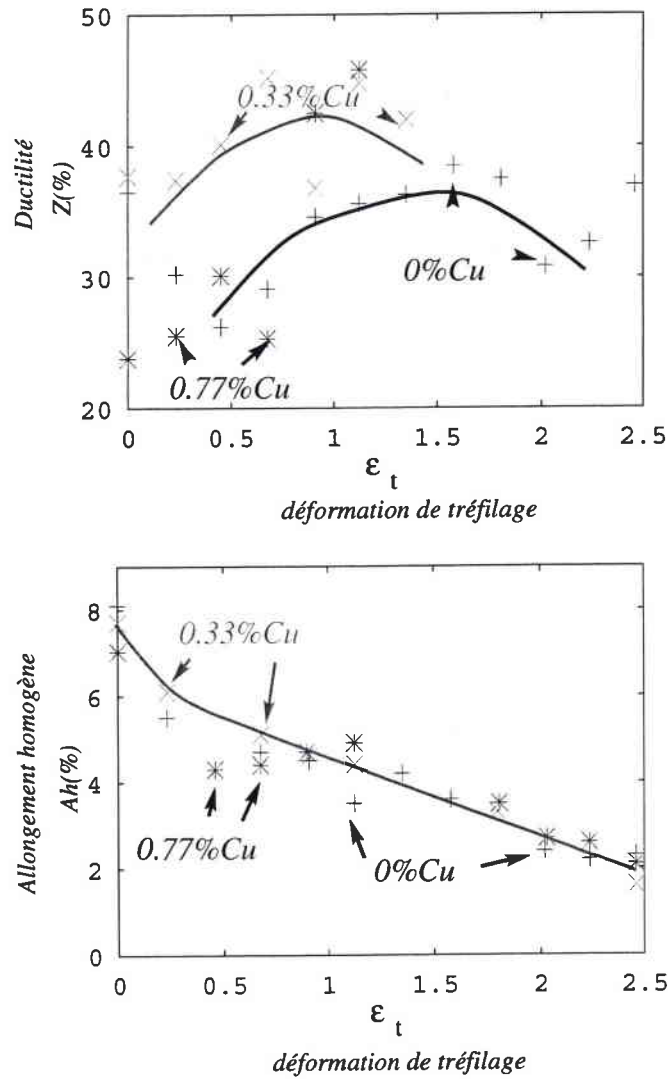


FIG. 10.4 – Evolution des caractéristiques mécaniques de traction (ductilité à la striction et allongement homogène) en fonction de l'enrichissement en élément résiduel Cu, après plusieurs passes au tréfilage.

contribue dans ces conditions à améliorer les propriétés de tréfilabilité de l'acier perlitique pour une déformation en tréfilage ne dépassant pas 1.5. Toutefois, du fait du caractère spectaculaire de ce résultat, ainsi que des dispersions de mesures, il serait nécessaire de reproduire ces essais.

Le tréfilage de la perlite engendre un durcissement du matériau, qu'il est possible de ca-

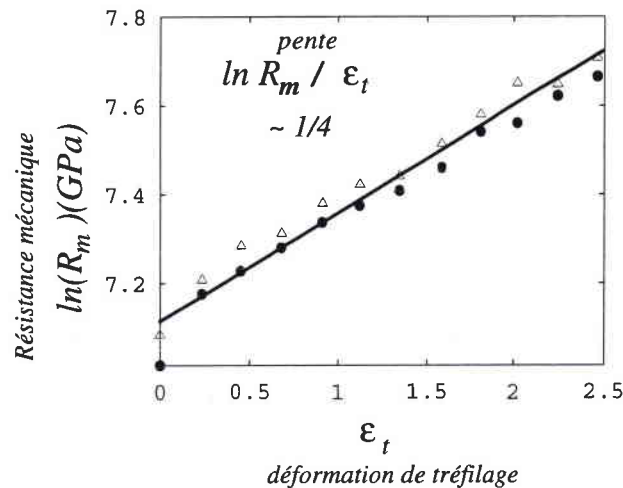


FIG. 10.5 – Courbe d'écrouissage en tréfilage des différentes nuances perlitiques étudiées. La pente obtenue est d'environ 1/4, ce qui mène à une loi d'écrouissage en $\exp(\epsilon_t/4)$.

racteriser avec la courbe d'écrouissage. L'évolution de la résistance mécanique des fils perlitiques suit une loi de type exponentielle, comme le suppose Langford [4]. La dépendance obtenue expérimentalement est du même type (voir figure 10.5). En fait, la pente d'écrouissage obtenue est d'environ 1/4. La modification des propriétés mécaniques liée à la présence du cuivre après tréfilage est essentiellement néfaste pour la nuance 3. Les propriétés de ductilité obtenues dans la fenêtre $\epsilon_t \in [0, 1.5]$ sont totalement bénéfiques à ce niveau pour la nuance 2. Pour comprendre alors les phénomènes sous-jacents à ces nouvelles propriétés potentielles, il est nécessaire de caractériser la présence du cuivre dans la morphologie perlitique à une autre échelle, celle des constituants et surtout de l'interface entre la ferrite et la cémentite.

Localisation du cuivre dans la perlite

Pour pouvoir comprendre le durcissement ou la ductilité du matériau lié aux différentes modifications de la microstructure, il est nécessaire de connaître, en plus de la modification de l'e.i., la répartition du cuivre dans les phases perlitiques. La démarche adoptée est une caractérisation de finesse croissante des états de précipitation ou solution solide du cuivre dans la perlite. Etant donné les dimensions de la structure, les instruments et techniques utilisées ne se limitent pas à la microscopie optique et électronique en balayage : en effet, on fait appel à la microscopie en transmission et à la microscopie ionique avec reconstruction tridimensionnelle du matériau ou sonde tomographique.

Khalid & al. [92] montrent dans le cas d'aciers hypereutectoïdes que la précipitation du cuivre (à hauteur de 1 à 2.5%) a lieu dans les deux phases perlitiques. De plus, ils caractérisent la présence de précipités à l'interface entre ferrite et cémentite, qui ont probablement germé à l'interface cémentite/austénite, et qui croissent grâce à la diffusion interphase [92].

11.1 Partition du cuivre dans les constituants

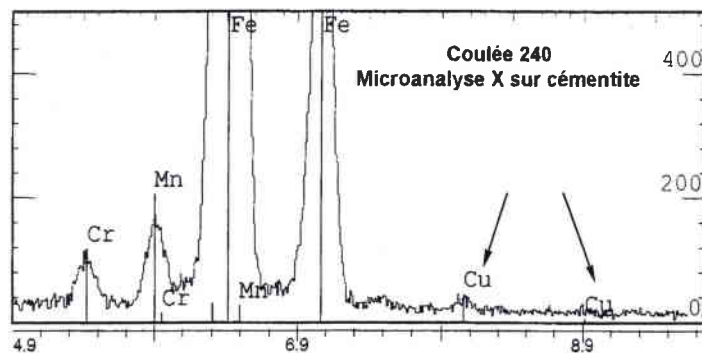


FIG. 11.1 – Caractérisation de la présence de cuivre dans la cémentite extraite de la nuance perlitique 3. On identifie deux pics, attribués au cuivre et la surface du pic permet de donner une première estimation de la teneur en poids de cuivre dans la cémentite [96].

Etant donnée la finesse de la microstructure, il est impossible de caractériser la partition du cuivre dans les phases perlitiques en microscopie électronique à balayage (la taille du spot est

limitante). Les résultats de microanalyses X (voir figure 11.1), réalisées par D. Bouleau à l'Irsid, en microscopie électronique à transmission (technique des répliques), montrent que le cuivre dans la nuance la plus enrichie (nuance 3) se trouve à l'état de trace dans la cémentite extraite, avec une teneur à la limite de la sensibilité de la sonde, soit 0.2%Cu en poids dans la cémentite. Les précipités présents dans la ferrite sont des nitrures d'aluminium [96]. Si la ferrite contient des précipités de cuivre, l'échelle d'observation ne permet pas de les caractériser en microscopie électronique en transmission.

11.2 Solution solide

Si le cuivre est exclusivement sous la forme de précipités dans la perlite, un revenu à 600°C devrait simplement provoquer la coalescence des lamelles de cémentite, la croissance des précipités de cuivre, ainsi qu'une globulisation de la perlite. Dans le cas présent, nous avons effectué un revenu à durée variable sur la perlite la plus enrichie en cuivre (nuance 3). On observe la présence d'un pic de dureté, caractéristique d'une transition solution solide/précipités, ou précipités $Cu - \alpha$ en $Cu - \epsilon$. Il est donc certain que le cuivre se trouve sous une autre forme que les précipités $Cu - \epsilon$, ou en solution solide.

La caractérisation de précipités nanométriques est fondamentale dans la détermination des effets directs du cuivre sur le comportement de la perlite. Elle n'est accessible aujourd'hui que grâce à des techniques de caractérisation très poussées, comme nous l'avons réalisé dans ce travail, par une reconstruction tridimensionnelle du matériau, à l'échelle des atomes.

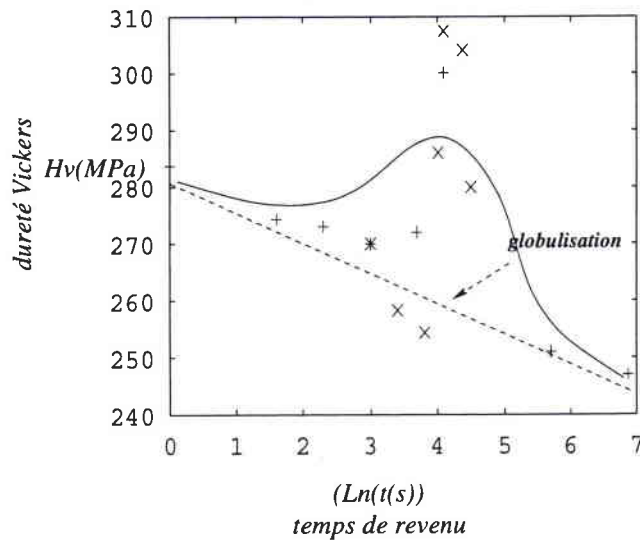


FIG. 11.2 – Caractérisation par essais de microdureté Vickers de l'évolution de la dureté de la perlite la plus enrichie en cuivre (nuance 3) en fonction du temps de revenu à 600°C. L'existence d'un pic dénote d'une transition dans l'état de précipitation du cuivre.

11.3 Etats de précipitation

La technique de caractérisation par la sonde atomique tomographique est complexe et ne fait pas l'objet de ce travail. Toutefois, nous allons étudier les résultats obtenus par X. Sauvage et l'équipe de F. Danoix (Guillaume Géandier, DEA)[89]. L'objectif de cette partie est d'obtenir la répartition spatiale dans l'espace réel de la composition chimique et structurale de l'acier, avec une résolution atomique. Le principe de la sonde atomique tomographique est basé sur le couplage d'un microscope ionique (capable d'ioniser ou évaporer les atomes par effet de champ), avec le spectromètre de masse à temps de vol, du matériau étudié. Un multidétecteur spatial permet alors de reconstruire en trois dimensions la position initiale des atomes (à partir des coordonnées latérales des atomes avant évaporation et du nombre de couches atomiques évaporées)[90].

L'analyse porte sur un volume limité du matériau (en général, un volume d'environ $10 \times 10 \text{ nm}^2$ de section, et 100nm de profondeur). L'analyse est effectuée au hasard dans l'acier, on peut supposer qu'elle est représentative de la répartition réelle des espèces chimiques. La figure 11.3 montre les résultats obtenus dans le cas d'une lamelle parallèle au volume analysé. Dans ce cas, Géandier [89] montre que la répartition du cuivre dans les deux phases est hétérogène, en général selon les proportions 2/3 dans la ferrite et 1/3 dans la cémentite [103]. Si la répartition est hétérogène entre les phases, elle l'est aussi à l'interface.

Une autre analyse permet de mettre en évidence la présence d'amas de fer-cuivre proche ou à l'interface entre les deux constituants (figure 11.4). Le fait d'observer ce type d'objet dans les échantillons analysés montre que ces amas sont probablement nombreux dans la microstructure. Etant donné la taille de l'amas caractérisé (environ 2 à 3 nm) et sa composition (environ 50%Cu-50%Fe), on peut supposer qu'il s'agit là d'un amas de cuivre (peut-être α), enrichi en fer. Ce type d'amas est impossible à détecter en microscopie électronique en transmission. On observe aussi la présence d'amas cuivreux nanométriques proches de l'interface, voire dans la cémentite [103], avec un taux de carbone non négligeable (environ 10% pour le cas de la particule 'à cheval' sur l'interface). En l'absence de tels amas, la ferrite semble être plus riche en cuivre.

Ces mesures sont confirmées par l'observation de Bouleau [96] effectuée sur les lamelles de cémentite extraites par la technique des répliques [96]. La vitesse de refroidissement de l'acier étudié est très lente (1°C s^{-1}) et un recuit d'une heure à 600°C offrent la possibilité au cuivre de diffuser dans le matériau. La décoration de l'interface entre lamelles par des précipités allongés, constitués essentiellement de cuivre (figure 11.5) est probablement la conséquence de la croissance des amas cuivreux observés en sonde tomographique.

Sauvage [103] estime la densité d'amas présents dans le volume, dans le cas de la nuance 3, à environ $3 \cdot 10^{22}$ particules par m^3 , soit une distance entre amas à l'interface de l'ordre de 30 nm. Il est possible que ces amas aient germé sur les marches de l'interface entre la ferrite et la cémentite.

11.4 Conclusion

La solubilité du cuivre dans l'austénite est grande (environ 9% massique à 900°C). Par contre, le cuivre est beaucoup moins soluble dans la ferrite. Après un refroidissement rapide, le cuivre est piégé en solution dans la ferrite et est susceptible de précipiter lors de traitements ultérieurs.

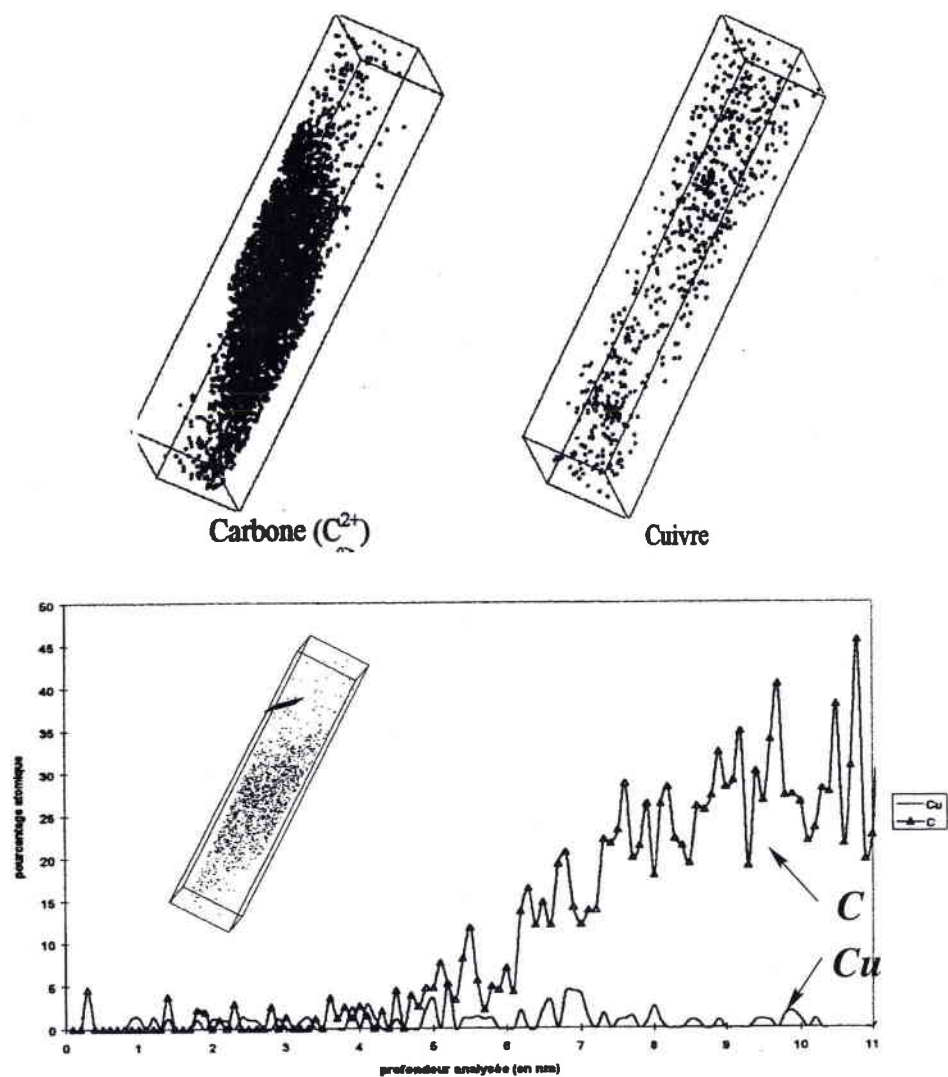


FIG. 11.3 – Le volume analysé a pour dimension $10 \times 10 \times 46 \text{ nm}^3$. A gauche, la répartition des atomes de carbone donne la position de la lamelle de cémentite. A droite, la répartition du cuivre est représentée dans le même volume. En parcourant le volume à l'aide d'une boîte de volume $5 \times 5 \times 0.1 \text{ nm}^3$, il est possible d'obtenir le profil de concentration des deux espèces chimiques dans le volume.

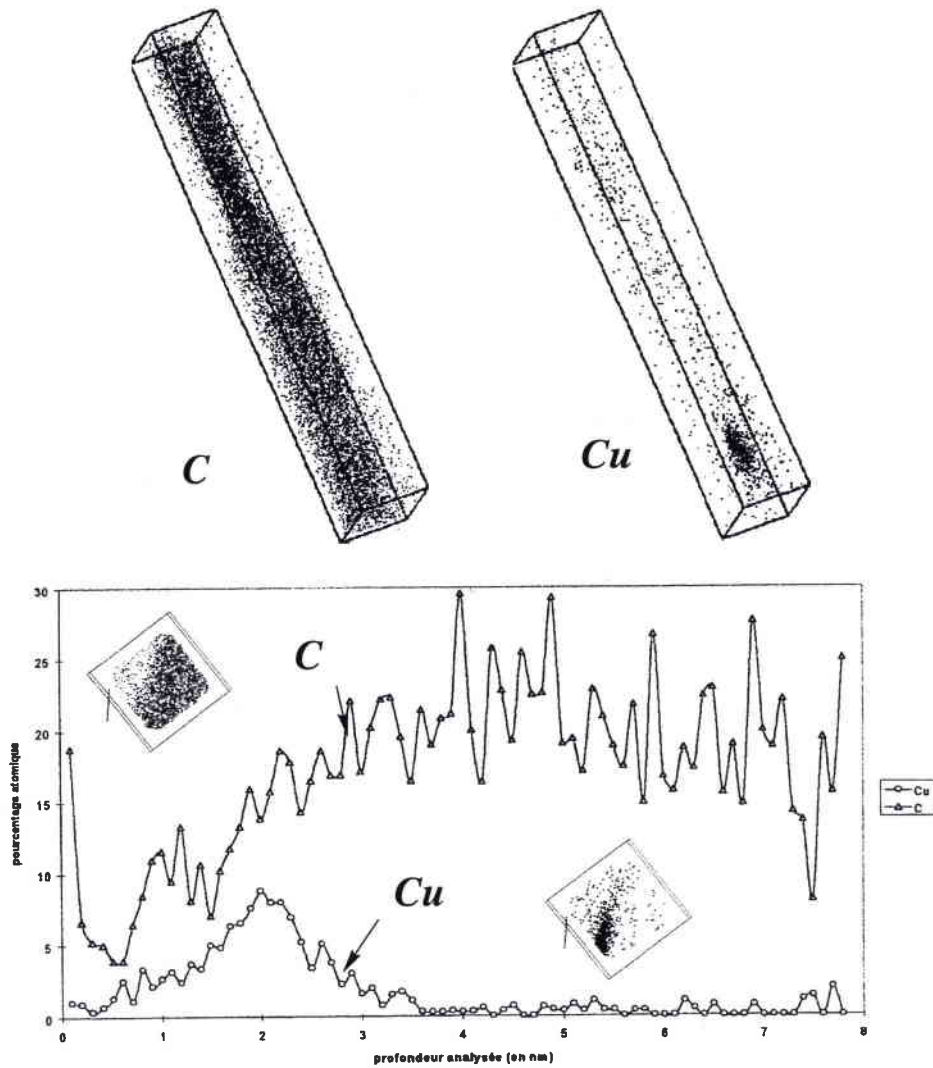


FIG. 11.4 – Le même volume est analysé, mais le profil de concentration autour de la particule de cuivre est effectué avec une boîte de dimension $2 \times 2 \times 5 \text{ nm}^3$ parcourant le volume. La composition de la particule est pour la moitié du cuivre, le reste étant du fer, le carbone étant ici mesuré à hauteur de $5\%_{\text{at}}$, soit quasiment absent de la particule.

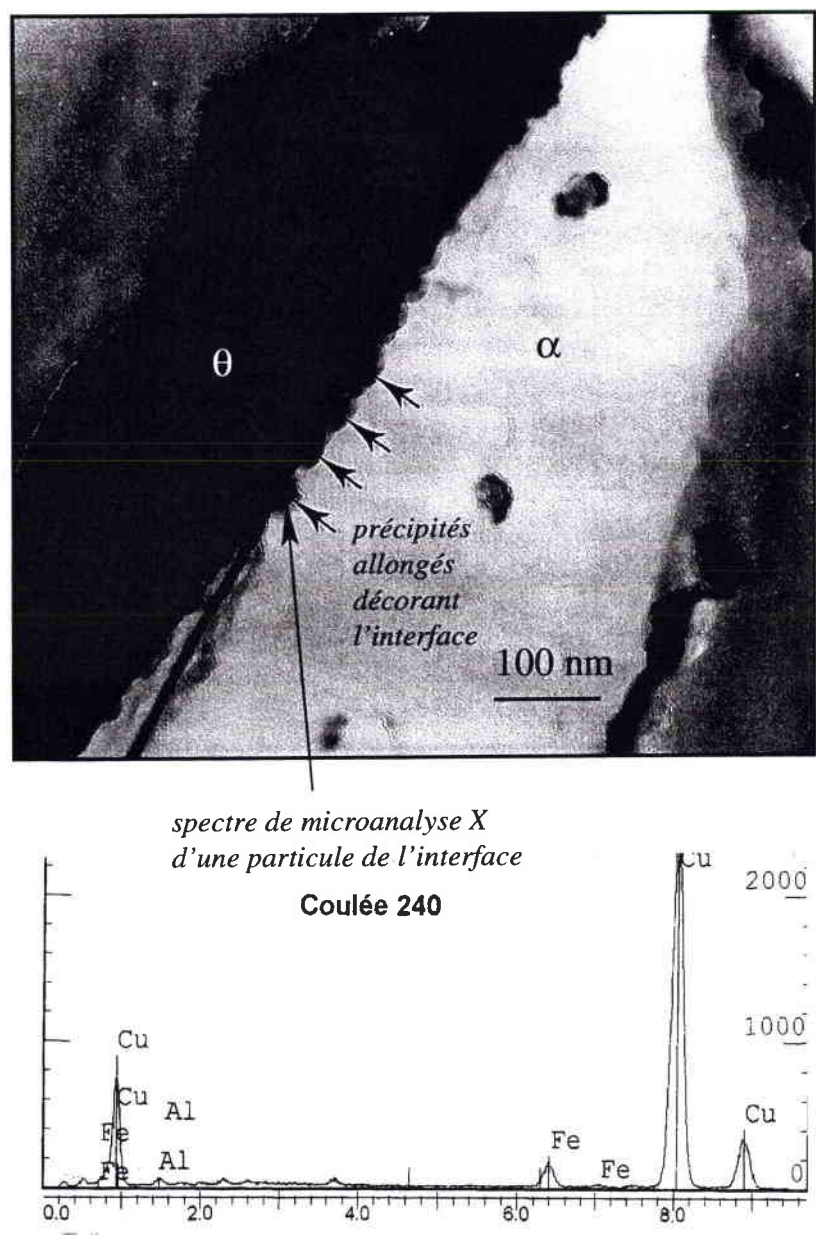


FIG. 11.5 – Caractérisation de la présence de cuivre le long de l'interface ferrite/cémentite de la nuance perlitique 3. La composition des précipités présents à l'interface est majoritairement du cuivre [96].

L'analyse de Bouleau [96] d'un échantillon recuit une heure à 600°C de la nuance 3 montre la présence de précipités de quelques 10 nm dans la ferrite. Ces observations confortent l'hypothèse selon laquelle le cuivre est en solution solide dans la ferrite, ainsi que sous la forme d'amas nanométriques (probablement du cuivre α) à l'interface ou dans les phases. La présence de précipités relativement grossiers à l'interface (photo 11.5) dans la nuance 3 est liée à la vitesse de refroidissement de l'échantillon qui est très faible (1°C/s) et à un recuit d'une heure à 600°C . Un refroidissement lent va donc contribuer à la précipitation du cuivre dans les phases de la perlite et à l'interface.

Les observations à la sonde atomique permettent de conforter la conclusion selon laquelle le cuivre est localisé à l'interface sous forme d'amas. Il est probable que dans le contexte industriel, le cuivre n'a pas le temps de diffuser suffisamment dans la microstructure pour former des précipités grossiers. Toutefois, étant donné la complexité de la formation de la perlite et des interdiffusions entre espèces chimiques à l'interface de croissance, il est possible que le cuivre bloque localement la progression de l'interface de croissance et diffuse selon les court-circuits de diffusion dans l'austénite en tête de front pour former un précipité mixte, qui germe de façon hétérogène sur les marches du plan d'habitat.

Enfin, si on rapproche l'évolution de la dureté de l'acier enrichi en cuivre (figure 11.2) avec les observations précédentes, il est probable que le pic de dureté observé correspond à l'effet couplé de la fin de la précipitation du cuivre α , le début de la transition entre cuivre α et cuivre ϵ et la globulisation de la cémentite [97].

La présence de ces amas à l'interface entre constituants de la perlite est peut être à l'origine de la ductilité surprenante obtenue pour la nuance 2 après tréfilage. On peut supposer en effet que ces amas sont nombreux et répartis de façon plus ou moins régulière le long de l'interface (les défauts de croissance de la perlite sont le lieu de germination préférentiel de ce type de précipité). Il est probable qu'un mode d'accommodation spécifique des hétérogénéités de la déformation a lieu par le cisaillement de ces amas. Ainsi, le cuivre va durcir la perlite, et dans le cas de la nuance 2, augmenter la ductilité du composite en offrant une sous-structure de la lamelle décorée de précipités cisillables. Tout se passe comme si l'interface entre lamelles, qui est le principal lieu d'accommodation de l'incompatibilité de déformation plastique, devenait plus 'souple' pour la nuance 2.

Conclusion

A l'échelle microscopique, le cuivre présente des états de précipitation multiples dans la perlite. Localisé dans les deux phases, il est associé aussi à une modification significative des propriétés de l'interface entre phases perlitiques, en s'y accumulant. Si on restreint les effets directs du cuivre au durcissement par solution solide dans la ferrite, le durcissement observé pour la nuance 2 en traction (environ 60 MPa sur la résistance mécanique) est supérieur à l'effet direct du cuivre $60 \cdot 0.33 = 19.8$ MPa. Dans ce cas, on peut estimer l'effet macroscopique de l'e.i. (réduction avec Cu) : en prenant la loi de Hall-Petch macroscopique, avec un coefficient moyen de Hall-Petch de $425 \text{ MPa} \cdot \sqrt{\mu\text{m}}$, pour la nuance 2, l'effet indirect du cuivre est d'environ 40 MPa. Le découplage des effets semble bien décrire le durcissement du cuivre. On obtient en effet le bon ordre de grandeur. On peut s'attendre toutefois à ce que la présence des précipités de cuivre à l'interface entre les constituants de la perlite contribue à favoriser la germination et la multiplication des dislocations sur l'interface-obstacle. C'est ainsi qu'il serait possible de caractériser l'émergence de nouvelles propriétés pour la nuance 2, avec l'amélioration couplée de la résistance et de la ductilité du fil dans un domaine de prédéformation en tréfilage connu.

Si on reprend le modèle de Embury et Fisher [2], il apparaît difficile de déterminer sans ambiguïté la signification du paramètre $k^{H.P.}$, coefficient de Hall-Petch, dans le contexte de la perlite. Le concept développé par Fisher et Cottrell [2] associe la valeur de $k^{H.P.}$ au mécanisme de germination des dislocations au voisinage du joint de phase. Même après une mise en forme sévère, les conditions de compatibilité de la déformation nécessite toujours la germination des dislocations. Si on suppose que la germination et la multiplication des dislocations aux interfaces sont déterminante (induisant une relation locale entre cission critique de glissement et e.i. du type λ_p^{-1}), l'incidence des modifications des propriétés de l'interface obstacle, liées à la présence d'amas de cuivre mixte, va déterminer la valeur de $k^{H.P.}$.

Dans le cas de la nuance 3, on prévoit un effet (indirect) d'espacement interlamellaire d'environ 90 MPa, couplé avec un effet direct d'environ $60 \cdot 0.77 = 46$ MPa, soit environ 140 MPa, ce qui est légèrement inférieur aux mesures de traction des fils non tréfilés. La ductilité des fils est très fortement affectée par le cuivre. A 0.33%Cu, la ductilité du fil est meilleure dans une fenêtre de 0 à 1.5 de déformation de tréfilage, mais ce résultat reste à confirmer.

Dans un tel contexte, l'interaction entre les amas de cuivre et les dislocations de la structure est probablement significative. Krishdanev & al. [93] notent que les précipités de cuivre (en particulier, ceux situés à l'interface) sont susceptibles de mieux répartir le glissement plastique

dans la ferrite et donc améliore la ductilité du fil perlitique. Toutefois, cette propriété est limitée à un domaine restreint de mise en forme et de taux de recyclage. De plus, du fait du caractère durcissant du cuivre, les fils non tréfilés possèdent un état de surface médiocre, probablement à l'origine de la disparité des mesures de résistance mécanique effectuée sur les fils tréfilés.

La caractérisation métallurgique du tréfilage de la perlite a mis en évidence le rôle déterminant de l'espacement interlamellaire. Les dimensions typiques de ces aciers industriels est de l'ordre de quelques 10nm à 100nm : les propriétés d'écoulement plastique sont affectées par ces dimensions sub-microniques ou nanométriques. Il est alors nécessaire de redéfinir les mécanismes élémentaires de déformation comme proposés dans la première partie de ce mémoire.

La suite de ce mémoire s'articule en trois parties, en relation avec les différentes échelles de description mises en oeuvre. Nous développons ainsi un modèle complexe basé sur les transitions d'échelles. Usant dans un premier temps du formalisme de Kröner-Eshelby pour décrire les effets de l'anisotropie des lamelles sur le comportement individuel des dislocations, les étapes suivantes consistent en une homogénéisation successive, en relation avec les hypothèses fortes émises dans la première partie du mémoire. Le comportement du monocristal est étudié ici de façon assez approfondie, du fait de l'importance des phénomènes dynamiques (et des termes algébriques associés) sur l'accommodation élastoplastique dans la perlite.

Notations générales

Les notations sont les suivantes :

- Les lettres minuscules sont réservées pour les variables locales et les lettres majuscules pour les correspondants globaux ou macroscopiques.
- La moyenne volumique d'une fonction $f(\mathbf{x})$ est notée

$$\overline{f(\mathbf{x})} = \langle f(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{V} \int_V f(\mathbf{x}) dV$$

- Le saut à l'interface cohérente entre deux milieux adjacents 1 et 2 est noté :

$$[\mathbf{X}] = \mathbf{X}^2 - \mathbf{X}^1$$

- Les tenseurs d'ordre 1, 2 et 4 sont représentés par des matrices en caractères gras. Les composantes sont exprimées par rapport à un repère cartésien orthonormé direct $(\mathbf{0}, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ fixe.
- La transposition (resp. l'inverse) est notée avec un exposant t (resp. $^{-1}$) à gauche (resp. à droite) du symbole de la matrice : $^t\mathbf{T}$ (resp. $\mathbf{T}^{-1}$)
- Les produits matriciels suivants sont utilisés :

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} &=> (u_i v_j)_{i,j} \\ \mathbf{T} \cdot \mathbf{v} &=> (T_{ij} v_j)_i \\ \mathbf{T} \cdot \mathbf{E} &=> (T_{ij} E_{jk})_{i,k} \\ \mathbf{T} : \mathbf{E} &=> T_{ij} E_{ji} \\ \mathbf{C} : \mathbf{E} &=> (C_{ijkl} E_{lk})_{i,j} \end{aligned}$$

la convention d'Einstein est employée.

- Les exposants ou indices ont la signification :

^e partie élastique

^p partie plastique

* du réseau (4ème partie)

^o du milieu de référence (5ème partie)

Notations

$\mathbf{u}(\mathbf{r})(\mathbf{u}^d)$: champ de déplacement local au point $\mathbf{r}$ ($\mathbf{u}^d$: à la frontière du solide)

$\boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{E}$: champs de contrainte et de déformation globales (homogènes)

$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}), \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{r})$: champs de contrainte et de déformation total (hétérogènes)

$\mathcal{L}, \mathbf{I}$: tenseur d'élasticité et tenseur identité

S^{Esh} : tenseur d'Eshelby

$\mathbf{m}^g, \mathbf{s}^g$: normale au plan de glissement g , direction de glissement g

$\mathbf{p}^g$: tenseur de Schmid symétrique

γ^g : intensité du cisaillement du plan de glissement g

Modélisation des mécanismes élémentaires de déformation

Introduction

Pour modéliser le comportement élastoplastique de composites complexes tels que la perlite, il est nécessaire de considérer l'échelle la plus fine [21, 23, 22] d'observation des phénomènes. La spécificité des mécanismes élémentaires de déformation dans le composite lamellaire est liée à la présence d'obstacles dont la nature est connue. L'échelle appropriée pour cette première étape de modélisation est celle de la germination et la multiplication des dislocations dans une lamelle monocristalline.

Nous avons vu précédemment (voir chapitre 3, [29, 55, 61, 4]) que la ferrite perlitique est susceptible, dans le cas d'une perlite grossière, de s'écouler en formant des sous-structures de dislocations, couramment appelées cellules. Par contre, dans le cas d'une perlite fine, la répartition du champ de déformation correspond à une distribution plus homogène des défauts[2]. De ces deux observations, il est possible de déduire que les mécanismes élémentaires de déformation sont fortement liés aux distances entre obstacles. Dans le premier cas, le libre parcours moyen des dislocations est déterminé par la taille de la cellule de dislocations, et le mode de déformation prédominant est la formation et l'évolution des cellules, soit un comportement collectif des dislocations. Le second cas correspond à une distance entre obstacles inférieure ou de l'ordre du libre parcours moyen des dislocations, et les mécanismes élémentaires de déformation sont affectés par la présence d'interfaces que l'on supposera rigides. Dans ce cas, le mouvement discret des dislocations est déterminant.

L'objectif de ce chapitre est d'obtenir la dépendance de la cisssion critique sur un système de glissement donné en fonction de la distance entre obstacles, soit l'espacement interlamellaire et ainsi, par un processus d'homogénéisation, la limite d'élasticité de la perlite.

A l'échelle d'une lamelle de l'îlot, l'hétérogénéité du champ de déformation plastique résulte essentiellement des propriétés de la microstructure, telles que l'orientation du grain monocristallin, sa morphologie lamellaire et les relations d'orientation entre les deux réseaux cristallographiques à l'interface (voir [38, 39]), ainsi que la nature des phases.

Les caractéristiques essentielles de la microstructure, à l'échelle la plus fine, sont :

- un champ de déformation plastique hétérogène qui se développe dans la lamelle sous contrainte imposée ;
- une faible densité de dislocations dans la lamelle (hypothèse fautive à l'interface).

Les modèles existants décrivent la dépendance de la limite d'élasticité de la perlite (échelle macroscopique) principalement selon une loi de type Hall-Petch, en supposant la formation d'empilements de dislocations à l'interface entre ferrite et cémentite. Récemment, Sevillano et Louchet [52, 24] proposent de caractériser la création et l'évolution de sources de dislocations naissant dans une lamelle ou à l'interface entre lamelles. En relation avec la nature rigide du renfort intermétallique, la multiplication de dislocations à partir de telles sources a aussi été étudiée [19]. Les études expérimentales résultent en diverses relations de dépendance (ou de non-dépendance) entre limite d'élasticité de la perlite et l'espacement interlamellaire. La multiplicité de ces lois phénoménologiques est la conséquence de la multiplicité des mécanismes élémentaires de déformation susceptible d'entrer en compétition lors de la déformation de la perlite. Afin d'atteindre les propriétés d'anisotropie du comportement élastoplastique de la perlite, il est nécessaire de prendre en compte la géométrie du glissement, ainsi que la forme lamellaire des grains monocristallins. Par transition d'échelles, il est alors possible d'introduire l'anisotropie cristalline liée à la nature des constituants (4ème partie du mémoire), mais aussi à la nature spécifique des obstacles au glissement des dislocations, dans le comportement de la perlite.

Dans une description micromécanique classique d'un polycristal [26], le mouvement discret des dislocations, leurs interactions et leur stockage aux joints de grains sont décrits en utilisant comme variable interne (ou cachée) la vitesse moyenne de glissement local. Ici, le même type de formalisme peut être utilisé, en utilisant comme variables celles caractérisant l'expansion de la boucle dans le volume du solide.

La boucle de dislocation, représentée par une inclusion d'Eshelby [18] est supposée se développer dans une lamelle, et stocke des branches de dislocations à l'interface entre lamelles. L'espacement interlamellaire est supposé suffisamment faible et fixe pour rester dans le cadre des hypothèses du modèle. Les caractéristiques morphologiques constituent les variables du problème, la direction et le plan de glissement de la boucle de dislocation (ou inclusion) sont donnés. On suppose que l'inclusion ellipsoïdale est à frontière mobile, de sorte à limiter le nombre de paramètres décrivant des mécanismes élémentaires de déformation.

Dans la première partie de ce chapitre, on détermine de façon générale l'énergie libre d'un grain monocristallin soumis à un état de contrainte donné, contenant une surface mobile de discontinuité plastique (pour le cas penny-shape, voir les travaux de I. Aubert [27]). On étudie les forces motrices associées aux variables morphologiques (internes) de la boucle de dislocation. Ces dernières sont au nombre de deux et permettent de décrire l'évolution de la boucle jusqu'à ce que celle-ci atteigne un obstacle, à savoir, l'interface rigide entre lamelles. A ce stade, le système perd un degré de liberté (puisque une des dimensions de la boucle est limitée à la distance entre obstacles).

On obtient l'évolution de la cission critique locale en fonction de la morphologie de l'inclusion et/ou de la taille de la microstructure.

Deux mécanismes physiques de déformation peuvent être associés : le premier cas (pas d'obstacle au mouvement de la boucle) peut être associé à la formation de cellules de dislocations (voir les travaux de I. Aubert [27]) ; le second (présence d'un obstacle rigide plan) peut correspondre à un mécanisme interfacial de stockage de défauts (voir [24, 19]).

Approche thermodynamique d'une inclusion à frontière mobile

On considère un solide de volume V , soumis à des déplacements $\mathbf{u}^d = \mathbf{E} \cdot \mathbf{x}$ à la frontière extérieure ∂V , et contenant des surfaces de discontinuité du champ de déformation plastique $\epsilon^p(\mathbf{r})$. $\mathbf{E}$ est un tenseur de déformation homogène. Les surfaces de discontinuités S du champ de déformation plastique sont supposées parfaites, i.e. les vecteurs de traction et de déplacement sont continus à travers S .

Le champ de déformation total $\epsilon(\mathbf{r})$ qui dérive du champ de déplacements compatible $\mathbf{u}(\mathbf{r})$,

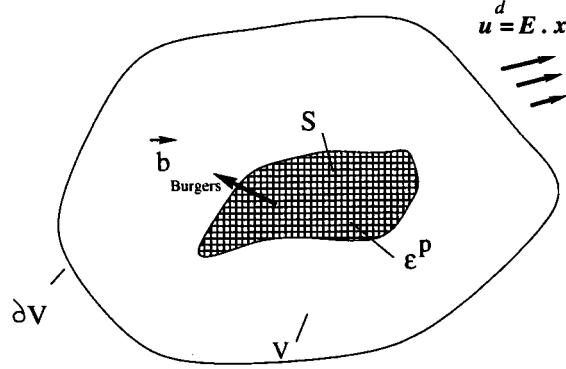


FIG. 14.1 – Schématisation d'un solide plastiquement inhomogène

peut être décomposé en une partie élastique $\epsilon^e(\mathbf{r})$ et une partie plastique $\epsilon^p(\mathbf{r})$:

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon^e(\mathbf{r}) + \epsilon^p(\mathbf{r}) \quad (14.1)$$

Le tenseur des contraintes de Cauchy $\sigma(\mathbf{r})$ et la déformation élastique $\epsilon^e(\mathbf{r})$ sont liés par la loi de Hooke, avec le tenseur d'élasticité $\mathcal{L}$:

$$\begin{aligned} \sigma(\mathbf{r}) &= \mathcal{L} : \epsilon^e(\mathbf{r}) \\ &= \mathcal{L} : (\epsilon(\mathbf{r}) - \epsilon^p(\mathbf{r})) \end{aligned} \quad (14.2)$$

14.1 Energie libre d'Helmholtz

Dans l'approximation isotherme, l'énergie libre d'Helmholtz $\phi(\mathbf{E}, \boldsymbol{\epsilon}^p)$ par unité de volume est réduite à l'énergie élastique, soit, pour un volume V :

$$\phi(\mathbf{E}, \boldsymbol{\epsilon}^p) = \frac{1}{V} \int_V \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) : (\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\epsilon}^p(\mathbf{r})) dV \quad (14.3)$$

La contrainte locale $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r})$ est alors la somme du tenseur global de contrainte $\boldsymbol{\Sigma}$ et des contraintes internes $\boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{r})$ qui résultent du champ de déformation plastique uniquement :

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{r}) \quad (14.4)$$

avec une valeur moyenne nulle :

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{r})} = \frac{1}{V} \int_V \boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{r}) dV = \mathbf{0}$$

Après quelques manipulations classiques [27], l'énergie libre adopte la forme suivante :

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{E}, \boldsymbol{\epsilon}^p) &= \frac{1}{2} (\mathbf{E} - \mathbf{E}^p) : \mathcal{L} : (\mathbf{E} - \mathbf{E}^p) \\ &- \frac{1}{2V} \int_V \boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{r}) : \boldsymbol{\epsilon}^p(\mathbf{r}) dV \end{aligned} \quad (14.5)$$

où $\mathbf{E}^p$ est la déformation plastique moyenne.

Dans l'expression (14.5), le premier terme représente l'énergie élastique d'un milieu homogène, le deuxième terme est lié aux contraintes internes du milieu. Si la microstructure est complexe, une estimation du second terme est difficile à obtenir.

14.2 Problème de l'inclusion-matrice

On considère maintenant le problème inclusion-matrice, où le volume V considéré est constitué d'une inclusion de volume V^i soumise à une déformation plastique uniforme $\boldsymbol{\epsilon}^{pi}$, et noyée dans une matrice élastique de volume V^m . Le champ de déformation plastique s'écrit alors sous la forme [27] :

$$\boldsymbol{\epsilon}^p(\mathbf{r}) = \begin{cases} \boldsymbol{\epsilon}^{pi} & \text{si } \mathbf{r} \in V^i \\ \mathbf{0} & \text{si } \mathbf{r} \in V^m \end{cases}$$

ce qui permet de simplifier l'expression de l'énergie libre par u.d.v. selon :

$$\phi(\mathbf{E}, \boldsymbol{\epsilon}^p) = \frac{1}{2} (\mathbf{E} - \mathbf{E}^p) : \mathcal{L} : (\mathbf{E} - \mathbf{E}^p) - \frac{1}{2} f^i \overline{\boldsymbol{\sigma}'(\mathbf{r})}^i : \boldsymbol{\epsilon}^{pi} \quad (14.6)$$

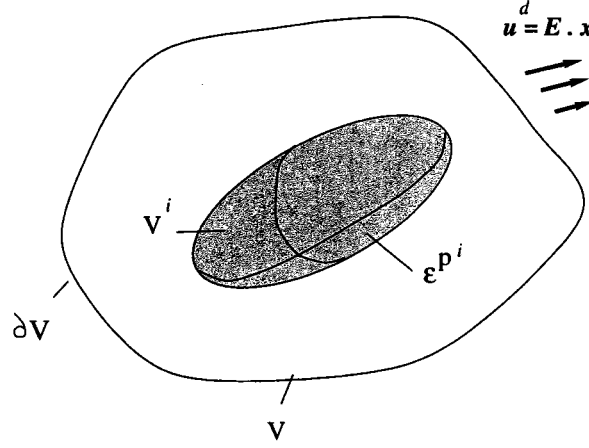


FIG. 14.2 – Schématisation du problème inclusion ellipsoïdale-matrice. Cas d'une inclusion hétérogène plastique.

où $f^i = \frac{V^i}{V}$ est la fraction volumique de l'inclusion dans le solide, et $\overline{\sigma'(\mathbf{r})}^i$ est la moyenne des contraintes internes dans le volume de l'inclusion V^i . En résolvant le problème de l'inclusion d'Eshelby[18], on montre que pour un champ de déformation plastique uniforme par morceaux, les contraintes internes sont homogènes dans une inclusion ellipsoïdale, et sont liées à la morphologie et l'orientation de l'inclusion via le tenseur d'Eshelby d'ordre 4, S^{Esh^i} , selon :

$$\overline{\sigma'(\mathbf{r})}^i = \sigma'^i = -\mathcal{L} : (\mathbf{I} - S^{Esh^i}) : \epsilon^{pi} \quad (14.7)$$

où $\mathbf{I}$ est le tenseur unité d'ordre 4.

14.3 Energie complémentaire - Forces motrices

Le terme pris en considération dans la suite de l'étude est l'énergie complémentaire par u.d.v. définie à partir de l'énergie libre selon :

$$\psi(\Sigma, \epsilon^{pi}) = \Sigma : E - \phi(E, \epsilon^{pi}) \quad (14.8)$$

soit :

$$\begin{aligned} \psi(\Sigma, \epsilon^{pi}) &= \frac{1}{2} \Sigma : \mathcal{L}^{-1} : \Sigma + f^i \Sigma : \epsilon^{pi} \\ &\quad - \frac{1}{2} f^i \epsilon^{pi} : \mathcal{L} : (\mathbf{I} - S^{Esh^i}) : \epsilon^{pi} \end{aligned} \quad (14.9)$$

Le phénomène physique à atteindre ici est l'expansion d'une boucle de dislocation dans un milieu élastique homogène. Dans ce cas, la déformation plastique moyenne contenue dans l'inclusion ellipsoïdale aplatie -représentative de la boucle- est constante, et l'ensemble des variables internes, noté $\mathbf{a}$ est de nature morphologique. Elles interviennent dans l'expression de l'énergie complémentaire par deux grandeurs, l'une scalaire -soit la fraction volumique $f^i(\mathbf{a})$ -, l'autre tensorielle -soit le tenseur d'Eshelby $S^{Esh^i}(\mathbf{a})$. Notons

$$\psi^*(\epsilon^{p^i}, \mathbf{a}) = -\frac{1}{2}f^i(\mathbf{a})\epsilon^{p^i} : \mathcal{L} : (\mathbf{I} - S^{Esh^i}) : \epsilon^{p^i} \quad (14.10)$$

et

$$\psi'(\Sigma, \epsilon^{p^i}, \mathbf{a}) = \psi(\Sigma, \epsilon^{p^i}, \mathbf{a}) - \frac{1}{2}\Sigma : \mathcal{L}^{-1} : \Sigma \quad (14.11)$$

Dérivant de l'énergie complémentaire, les forces motrices associées aux variables internes a_k prennent la forme :

$$F_{a_k}(\mathbf{a}) = \frac{\partial \psi(\Sigma, f^i(\mathbf{a}), \mathcal{S}^{Esh^i}(\mathbf{a}))}{\partial a_k} \quad (14.12)$$

Pour compléter cette étude, l'évolution des variables internes doit être décrite par des lois complémentaires. Dans le cas d'un événement réversible, les forces motrices vérifient :

$$F_{a_k} = 0 \quad (14.13)$$

Pour un phénomène irréversible, comme dans l'approche de la plasticité classique, il est nécessaire d'introduire des forces critiques, avec :

$$F_{a_k} = F_{a_k}^c \quad (14.14)$$

En résolvant (14.13), il est possible d'obtenir l'évolution des variables morphologiques en fonction de la contrainte imposée Σ .

Si étudier la stabilité d'un phénomène physique revient à déterminer le jeu de paramètres caractéristiques du problème qui maximisent l'énergie complémentaire (ou annulent les forces motrices), il reste à définir ces variables morphologiques.

Applications

Tous les calculs sont effectués pour un milieu homogène élastique ayant les caractéristiques métallurgiques et mécaniques de la ferrite, soient $\mu=80$ GPa, $\nu=0.27$ et $d_{110}=0.2028$ nm et $b_{\text{Bürgers}}^g=0.2482$ nm. La germination et l'expansion de la boucle de dislocation sont supposé être spontanées.

L'inclusion d'Eshelby utilisée est l'ellipsoïde plat, soit :

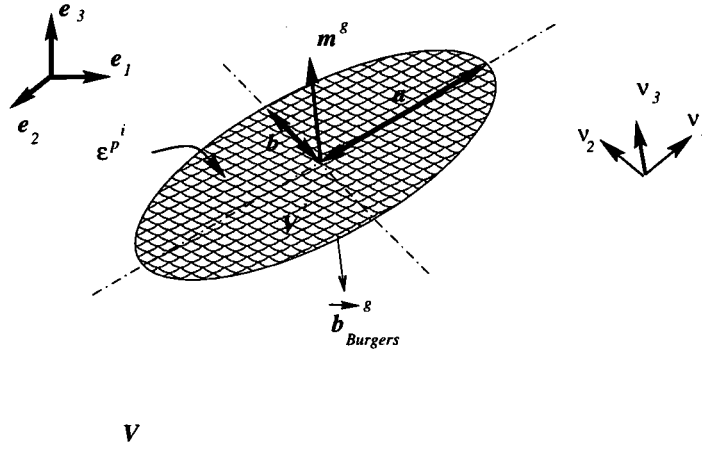


FIG. 15.1 – Schéma de l'inclusion aplatie représentant la boucle de dislocation dans le milieu élastique homogène. Le repère (ν_1, ν_2, ν_3) de l'inclusion (volume V^i) est représenté, orienté par rapport au repère (e_1, e_2, e_3) du milieu (volume V) élastique homogène. m^g est la normale unitaire au plan de glissement g de vecteur de Burgers égal à $\vec{b}_{\text{Bürgers}}^g = b_{\text{Bürgers}}^g s^g$.

$$a > b \gg c$$

où a et b sont les dimensions principales de l'ellipsoïde plat et c est la distance interréticulaire des plans cristallographiques de normale m^g pour le système de glissement g :

$$d_{hkl} = c = a^{\alpha - Fe} / \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

Les symétries matérielles de cette inclusion sont représentées dans l'expression de l'énergie par le tenseur d'Eshelby S^{Esh^i} dont les composantes sont explicitées selon :

$$\begin{aligned} S_{1111}^{Esh^i} &= \frac{3}{8\pi(1-\nu)} a^2 I_{11} + \frac{1-2\nu}{8\pi(1-\nu)} I_1 \\ S_{1133}^{Esh^i} &= \frac{1}{8\pi(1-\nu)} c^2 I_{13} + \frac{1-2\nu}{8\pi(1-\nu)} I_1 \\ S_{1313}^{Esh^i} &= \frac{b^2 + c^2}{16\pi(1-\nu)} I_{13} + \frac{1-2\nu}{16\pi(1-\nu)} (I_1 + I_3) \end{aligned} \quad (15.1)$$

où les intégrales I_{ij} et I_k sont fonctions des intégrales elliptiques de première et seconde espèce, respectivement :

$$\begin{aligned} E(m) &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} (1 - m \sin^2 \phi)^{\frac{1}{2}} d\phi \\ K(m) &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} (1 - m \sin^2 \phi)^{-\frac{1}{2}} d\phi \end{aligned} \quad (15.2)$$

Les autres composantes du tenseur d'Eshelby non nulles se déduisent par symétries ($S_{ijkl}^{Esh^i} = S_{jikl}^{Esh^i} = S_{ijlk}^{Esh^i}$) et permutations circulaires du triplet (1,2,3).

15.1 Variables morphologiques κ et ρ

Pour simplifier l'analyse des forces motrices, on définit deux variables à partir de a et b soient κ et ρ , avec

$$\kappa = \frac{1}{1 - (\frac{b}{a})^2} \quad (15.3)$$

$$\rho = \frac{a}{d_{h,k,l}} \quad (15.4)$$

La première de ces variables représente la forme de la boucle, soit, si $\kappa \sim 1$, la boucle sera proche d'une fibre ($b \ll a$), si $\kappa \gg 1$, la boucle sera proche d'une pièce de monnaie ($a \sim b$). La deuxième, ρ permet de caractériser la taille de la boucle, donc si $\rho \sim 1$, la boucle sera proche d'un défaut ponctuel, et pour $\rho \gg 1$, la boucle sera de taille plus grande (voir figure 15.2). Dans le cas d'un ellipsoïde plat, Mura [36] donne les relations entre composantes du tenseur d'Eshelby et intégrales elliptiques par l'intermédiaire des intégrales :

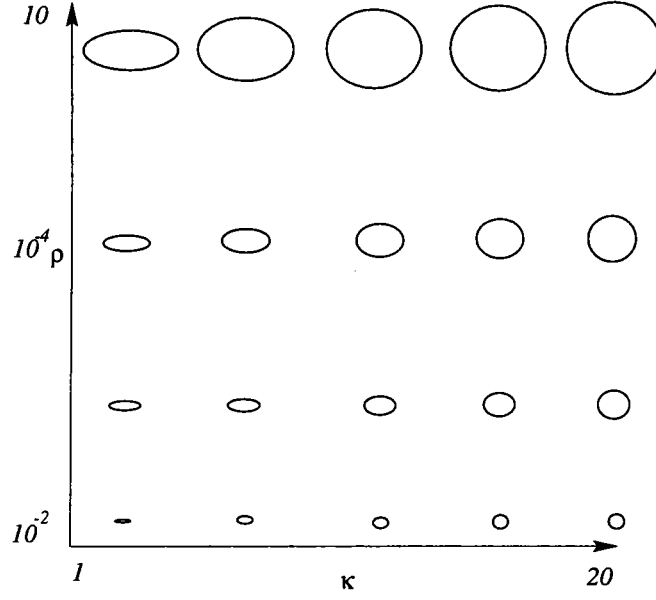


FIG. 15.2 – Morphologie de l'inclusion en fonction des variables κ et ρ . Comme $\rho = a/d_{110}$ et $d_{110} \sim 10^{-4} \mu\text{m}$, pour $10^{-4}\rho \sim 2$, $a \sim 2\mu\text{m}$ à un facteur 2 près.

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \frac{4\pi\sqrt{\kappa(\kappa-1)}}{\rho} (K(\kappa^{-1}) - E(\kappa^{-1})) \\
 I_2 &= \frac{4\pi}{\rho} \sqrt{\frac{\kappa}{\kappa-1}} (\kappa E(\kappa^{-1}) - (\kappa-1)K(\kappa^{-1})) \\
 I_3 &= 4\pi - \frac{4\pi}{\rho} \sqrt{\frac{\kappa}{\kappa-1}} E(\kappa^{-1}) \\
 I_{12} &= \frac{4\pi\kappa^{3/2}}{d_{h,k,l}^2 \rho^3 \sqrt{\kappa-1}} ((2\kappa-1)E(\kappa^{-1}) - 2(\kappa-1)K(\kappa^{-1})) \\
 I_{23} &= \frac{4\pi}{d_{h,k,l}^2 \rho^3} \left(\frac{\kappa}{\kappa-1}\right)^{3/2} \left(\rho \sqrt{\frac{\kappa-1}{\kappa}} + (1+\kappa)E(\kappa^{-1}) + (\kappa-1)K(\kappa^{-1})\right) \\
 I_{13} &= \frac{4\pi}{d_{h,k,l}^2 \rho^3} \left(\frac{\kappa}{\kappa-1}\right)^{3/2} \left(\rho \sqrt{\frac{\kappa-1}{\kappa}} + (1+\kappa)E(\kappa^{-1}) + (\kappa-1)K(\kappa^{-1})\right) \\
 I_{33} &= \frac{4\pi}{3d_{h,k,l}^2}
 \end{aligned} \tag{15.5}$$

On comprend bien ici la complexité de l'expression de l'énergie complémentaire, qu'il est nécessaire de dériver pour obtenir celle des forces motrices. Cette difficulté peut être contournée par l'utilisation de la formulation invariante, et conduit à une expression plus élégante de l'énergie complémentaire, en considérant les propriétés de symétrie et conditions d'invariance[27] du solide étudié (voir annexe A). D'après l'équation (14.9) considérant le système de glissement g , l'expression de l'énergie complémentaire peut s'écrire sous la forme :

$$\psi(\Sigma, \kappa, \rho) = \frac{1}{2} \Sigma : \mathcal{L}^{-1} : \Sigma + f^i(\kappa, \rho) \gamma^g (\chi(\kappa, \rho, \mathbf{p}^g) \gamma^g + \mathbf{p}^g : \Sigma) \tag{15.6}$$

avec

$$\begin{aligned}
 \chi(\kappa, \rho, \mathbf{p}^g) = & \frac{\mu}{8\pi(\nu-1)} \left((8\pi - 3d_{h,k,l}^2 \rho^2 I_{11} - I_1) p_{11}^{g2} \right. \\
 & + (8\pi - 3d_{h,k,l}^2 \rho^2 \frac{\kappa-1}{\kappa} I_{22} - I_2) p_{22}^{g2} + (8\pi - 3d_{h,k,l}^2 I_{33} - I_3) p_{33}^{g2} \\
 & + (8\pi + 2(1-2\nu)I_3 - 2d_{h,k,l}^2 \rho^2 \frac{2\kappa-1}{\kappa} I_{12}) p_{12}^{g2} \\
 & + (8\pi + 2(1-2\nu)I_2 - 2d_{h,k,l}^2 (\rho^2 + 1) I_{13}) p_{13}^{g2} \\
 & + (8\pi + 2(1-2\nu)I_1 - 2d_{h,k,l}^2 (1 + \rho^2 \frac{\kappa-1}{\kappa}) I_{23}) p_{23}^{g2} \\
 & + (4\pi + (4\nu-1)I_3 - d_{h,k,l}^2 \rho^2 \frac{2\kappa-1}{\kappa} I_{12}) p_{11}^g p_{22}^g \\
 & + (4\pi + (4\nu-1)I_2 - d_{h,k,l}^2 (\rho^2 + 1) I_{13}) p_{11}^g p_{33}^g \\
 & \left. + (4\pi + (4\nu-1)I_1 - d_{h,k,l}^2 (1 + \rho^2 \frac{\kappa-1}{\kappa}) I_{23}) p_{22}^g p_{33}^g \right) \quad (15.7)
 \end{aligned}$$

et

$$f^i(\kappa, \rho) = \frac{4\pi d_{h,k,l}^3}{3} \rho^2 \sqrt{\frac{\kappa-1}{\kappa}} \quad (15.8)$$

On voit apparaître ici un terme local $\tau^g = \mathbf{p}^g : \boldsymbol{\Sigma}$ où $p_{ij}^g = \frac{1}{2}(m_i^g s_j^g + m_j^g s_i^g)$ est le tenseur de Schmid symétrique du système de glissement g , et $\mathbf{s}^g$ est la direction unitaire de glissement. L'intensité du glissement sur g , γ^g est connue, puisqu'une boucle de dislocation provoque par son passage un glissement du cristal égal à :

$$\gamma^g = \frac{b_{\text{Bürgers}}^g}{d_{h,k,l}}$$

L'énergie complémentaire du système est alors fonction d'une force thermodynamique τ^g associée à la morphologie (κ, ρ) et la géométrie du glissement $(\mathbf{m}^g, \mathbf{s}^g)$.

On trace l'évolution de l'énergie libre $\phi'(\kappa, \rho)$ pour une force motrice donnée $\tau^g = 10$ MPa dans le cas 3 décrit dans le paragraphe suivant. La surface prend la forme d'une selle de cheval (voir figure 15.3), caractéristique d'un optimum local, ici, maximum de l'énergie libre. Ce point critique, représenté par les coordonnées $(\phi'_c, \kappa_c, \rho_c)$ pour une force motrice τ^g donnée, correspond à une position métastable de la boucle de dislocation. Le phénomène peut alors être décrit selon : on suppose la germination et la croissance de boucles spontanées sous une cission donnée τ^g ; si une boucle atteint le point critique $(\phi'_c, \kappa_c, \rho_c)$, elle est susceptible de s'étendre de façon instable, ou de disparaître (voir figure 15.3). Dans le cas d'une création et expansion instable de la boucle, celle-ci s'étend jusqu'à atteindre le prochain obstacle, joint de grain, mur de cellule (a_{max}) etc. et stocke une partie de l'énergie de déformation sous forme de défaut.

Il est possible de prendre le problème dans l'autre sens : à une morphologie donnée de la boucle (κ_0, ρ_0) , correspond une cission critique τ_c^g nécessaire à l'activation du mécanisme de stockage de défauts. Cette cission est alors fonction de :

- la morphologie de l'inclusion (volume V^i) (κ_0, ρ_0) ;

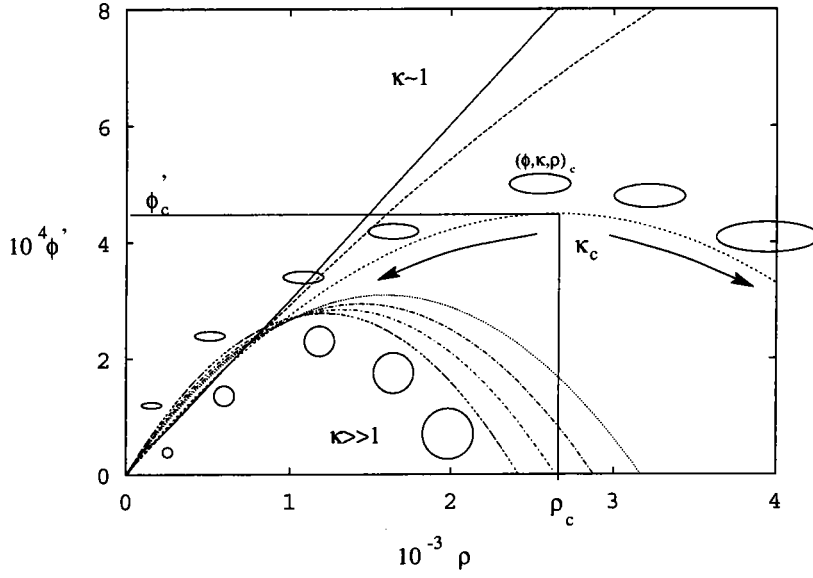


FIG. 15.3 – Evolution de l'énergie libre d'Helmholtz $\phi'_3(\kappa, \rho) = -\psi'_3(\kappa, \rho)$ en fonction des variables morphologiques pour $\tau^g = 10$ MPa. Identification d'un état local métastable $(\phi_c, \rho_c, \kappa_c)$.

- la géométrie connue du glissement $\mathbf{m}^g, \mathbf{s}^g$;
- la morphologie du grain (volume V) ou la présence d'obstacles $a_{max} \sim 1$ à $10\mu\text{m}$.

Pour déterminer l'expression de τ_c^g on utilise le critère (14.13), c'est pourquoi il est nécessaire d'étudier les forces thermodynamiques associées aux variables internes (κ, ρ) .

15.2 Forces Motrices

Pour simplifier l'étude présentée, on étudie les trois cisaillements :

$$\epsilon_1^p = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{\gamma}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{\gamma}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\epsilon_2^p = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\gamma}{2} & 0 \\ \frac{\gamma}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\epsilon_3^p = \epsilon_1^p + \epsilon_2^p$$

qui représentent différentes directions de Burgers pour la boucle de dislocations (voir figure 15.4). L'expression de l'énergie complémentaire devient alors pour le cas 3 :

$$\begin{aligned} \psi'_3(\tau, \kappa, \rho) &= \frac{\mu \pi d_{h,k,l} b_{\text{Burgers}}^2}{48(1-\nu)(\kappa-1)\rho} \left[\rho \sqrt{\frac{\kappa-1}{\kappa}} (2\kappa-1 + 32(\kappa-1)\rho^2 \frac{(1-\nu)\tau}{\mu\gamma^g}) \right. \\ &\quad \left. + 2((1-\kappa)(1+(2-\nu)\rho^2) - \kappa)E(\kappa^{-1}) + (\kappa-1)K(\kappa^{-1}) \right] \end{aligned} \quad (15.9)$$

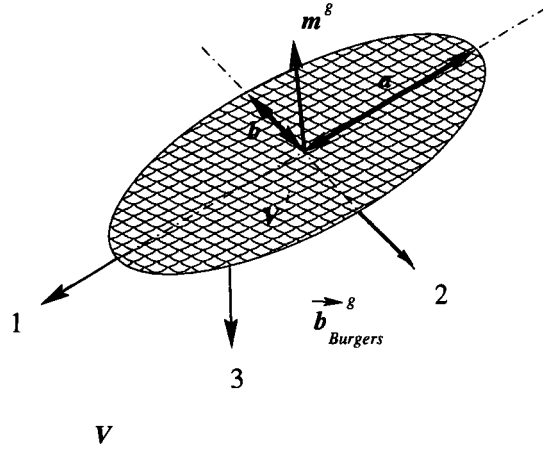


FIG. 15.4 – Représentation des différentes directions de glissement pour les trois cas étudiés.

Si on se place dans le cas réversible, les optima locaux de l'énergie complémentaire sont donnés par les zéros des forces motrices. La stabilité de ces points est alors étudiée d'après l'évolution des forces motrices selon le principe suivant : l'évolution "naturelle" du paramètre étudié suit le signe de la force motrice correspondante [27]. Dans le cas 3, les deux forces motrices associées aux variables internes (κ, ρ) adoptent l'expression :

$$\begin{aligned}
 f_{\kappa}(\kappa, \rho, \tau^g) &= \frac{F_{\kappa}(\kappa, \rho, \tau^g)}{\pi d_{h,k,l}^2 b_{\text{Burgers}}^g} = \frac{1}{\pi d_{h,k,l}^2 b_{\text{Burgers}}^g} \frac{\partial \psi(\kappa, \rho, \tau^g)}{\partial \kappa} \\
 &= \frac{\mu \gamma^g}{96(1-\kappa)^3 \kappa (1-\nu) \rho} \left[(2(1-2(\nu-2)\rho^2) \right. \\
 &\quad - \kappa(1-4(\nu-2)\rho^2) - \kappa^2(2(\nu-2)\rho^2-3)) E(\kappa^{-1}) \\
 &\quad + \frac{\kappa-1}{\kappa} (32\rho^3(\kappa-1) \frac{(1-\nu)\tau^g}{\mu \gamma^g} - \rho \\
 &\quad \left. + \sqrt{\frac{\kappa-1}{\kappa}} (1-2(\nu-2)\rho^2 + \kappa(2(\nu-2)\rho^2-3)) K(\kappa^{-1})) \right] \quad (15.10)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 f_{\rho}(\kappa, \rho, \tau^g) &= \frac{F_{\rho}(\kappa, \rho, \tau^g)}{\pi d_{h,k,l}^2 b_{\text{Burgers}}^g} = \frac{1}{\pi d_{h,k,l}^2 b_{\text{Burgers}}^g} \frac{\partial \psi(\kappa, \rho, \tau^g)}{\partial \rho} \\
 &= \frac{\mu \gamma^g}{48(\kappa-1)(1-\nu)\rho^2} \left[\right. \\
 &\quad 2(1+(\nu-2)\rho^2 - \kappa(2+(\nu-2)\rho^2)) E(\kappa^{-1}) \\
 &\quad \left. + (1-\kappa) (64 \sqrt{\frac{\kappa-1}{\kappa}} \rho^3 \frac{\tau^g(1-\nu)}{\mu \gamma^g} - K(\kappa^{-1})) \right] \quad (15.11)
 \end{aligned}$$

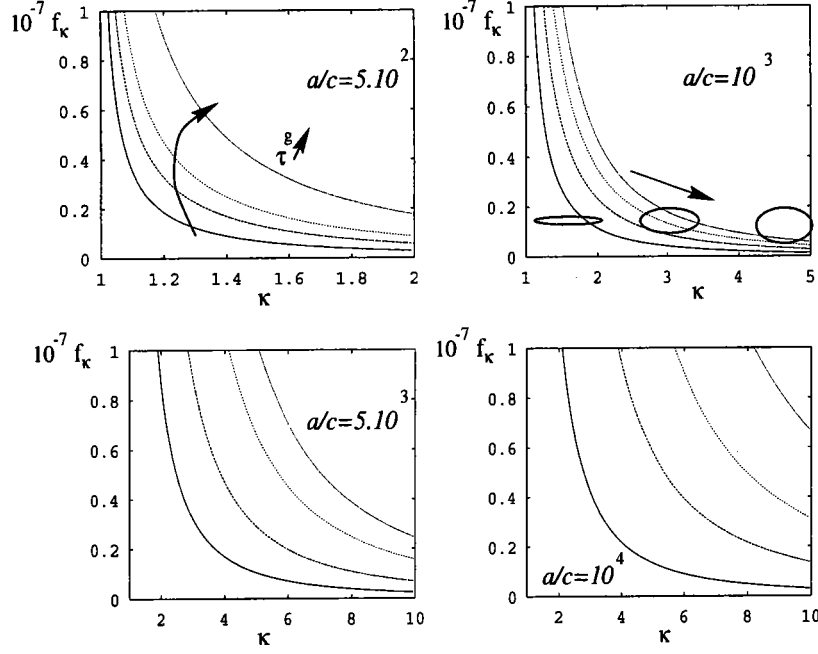


FIG. 15.5 – Evolution de la force motrice $f_\kappa(\kappa)|_\rho$ en fonction de la variable κ pour différentes cission τ^g .

On voit ici (figure 15.5) l'évolution du paramètre forme de boucle κ et de sa force motrice associée $f_\kappa(\kappa)$ pour une taille de boucle $\rho = a/c$ donnée. Dans tous les cas,

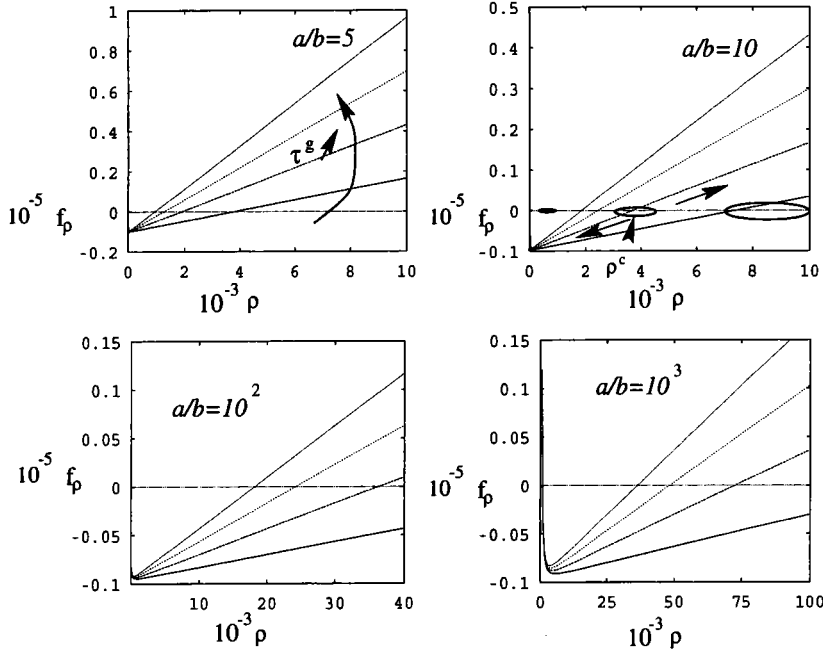
$$f_\kappa > 0, \quad \forall(\kappa, \rho)$$

Le système tend alors à augmenter le paramètre κ , ce qui correspond à l'évolution de la boucle vers une forme de pièce de monnaie.

L'évolution de la force motrice associée à ρ est donnée figure 15.6. On peut observer que le signe de la force motrice f^ρ change. En effet, dans le domaine d'étude des paramètres morphologiques, on a :

$$\begin{aligned} f_\rho &> 0 \quad \forall \rho > \rho_c(\kappa), \forall \kappa > 1 \\ f_\rho &< 0 \quad \forall \rho < \rho_c(\kappa), \forall \kappa > 1 \end{aligned}$$

On peut alors résumer l'événement comme suit : si une boucle de dislocation germe dans le solide, elle est susceptible d'atteindre la taille critique ρ^c pour une morphologie donnée, sous une contrainte macroscopique Σ . Si on déplace cet état d'équilibre métastable vers une taille plus petite, la boucle va disparaître, si la boucle dépasse la taille critique, elle s'étend alors jusqu'à rencontrer le premier obstacle. Celui-ci peut être associé à un mur de cellules de dislocations ou à un joint de grain.


 FIG. 15.6 – Evolution de la force motrice $f_p(\rho)|_\kappa$ en fonction de la variable ρ pour différentes cission τ^g .

15.3 Cellules de dislocation

Dans ce cas, la force motrice f_p est déterminante pour le mécanisme sous-jacent de stockage de défaut, et l'évolution de la cission τ^g peut être obtenue en annulant $f_p(\kappa, \rho, \tau^g)$. On obtient alors, dans le cas 3 :

$$\begin{aligned} \tau_3^g(\kappa, \rho) &= \frac{\mu \gamma^g}{64(1-\nu)} \frac{\sqrt{\kappa}}{\rho^3(\kappa-1)^{3/2}} (2(1-(2-\nu)\rho^2) \\ &\quad - \kappa(2-(2-\nu)\rho^2)) E(\kappa^{-1}) + (\kappa-1)K(\kappa^{-1})) \end{aligned} \quad (15.12)$$

une dépendance de τ^g avec l'inverse de la taille de grain ou cellule a , via le paramètre $\rho^{-1} = d_{110}/a$. Celle-ci reste linéaire dans le domaine de validité physique de ρ , correspondant à une taille de cellules allant de $0.1\mu\text{m}$ à $1\mu\text{m}$ (voir figure 15.7), et pour un facteur de forme $\kappa > 1 + 10^{-6}$, soit un rapport $a/b = 10^3$. Au delà de ce rapport de forme, on sort de l'hypothèse (15.12) et la relation cission/inverse de taille de grain n'est plus linéaire.

Pour caractériser l'effet de l'orientation du vecteur de Burgers, soit le caractère de la dislocation, on compare l'évolution de τ^g dans les trois cas présentés. Si on reste dans le domaine de validité des hypothèses exprimées précédemment, alors :

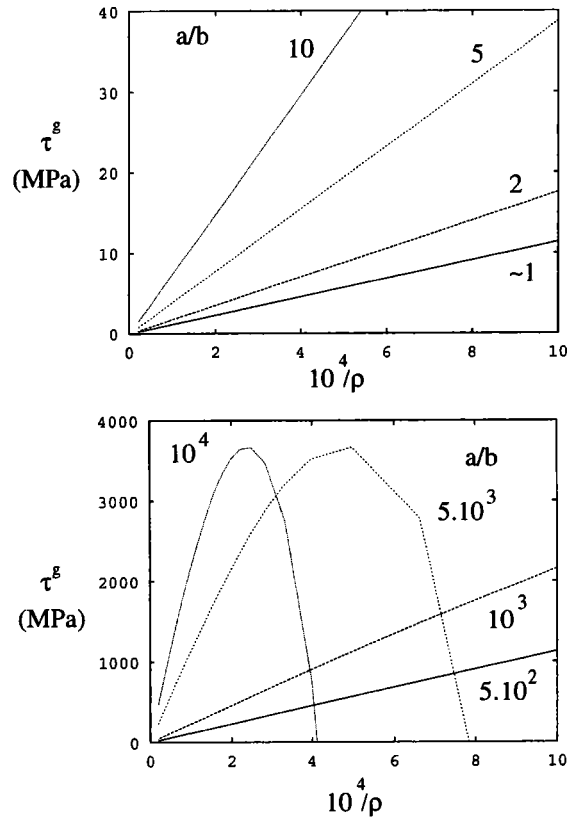


FIG. 15.7 – Evolution de la cission τ^g en fonction de l'inverse de la taille de grain a ou cellule $10^4 \rho^{-1} = 10^4 d_{110}/a$.

$$\begin{aligned}\tau_1^g(\kappa, \rho) &= \frac{\mu\gamma^g}{32(1-\nu)} \frac{\sqrt{\kappa}}{\rho^3\sqrt{\kappa-1}} ((\kappa-2+2\rho^2(1-\kappa\nu))E(\kappa^{-1}) \\ &+ (\kappa-1)(2\nu\rho^2-1)K(\kappa^{-1}))\end{aligned}\quad (15.13)$$

$$\begin{aligned}\tau_2^g(\kappa, \rho) &= \frac{\mu\gamma^g}{32(1-\nu)} \frac{\sqrt{\kappa}}{\rho^3(\kappa-1)^{3/2}} (\\ &- 2(1-\nu)\rho^2 - \kappa^2(1-2\nu\rho^2) - \kappa(1+2(2\nu-1)\rho^2)E(\kappa^{-1}) \\ &+ (\kappa-1)(2\nu\rho^2 - \kappa(2\nu\rho^2-1))K(\kappa^{-1}))\end{aligned}\quad (15.14)$$

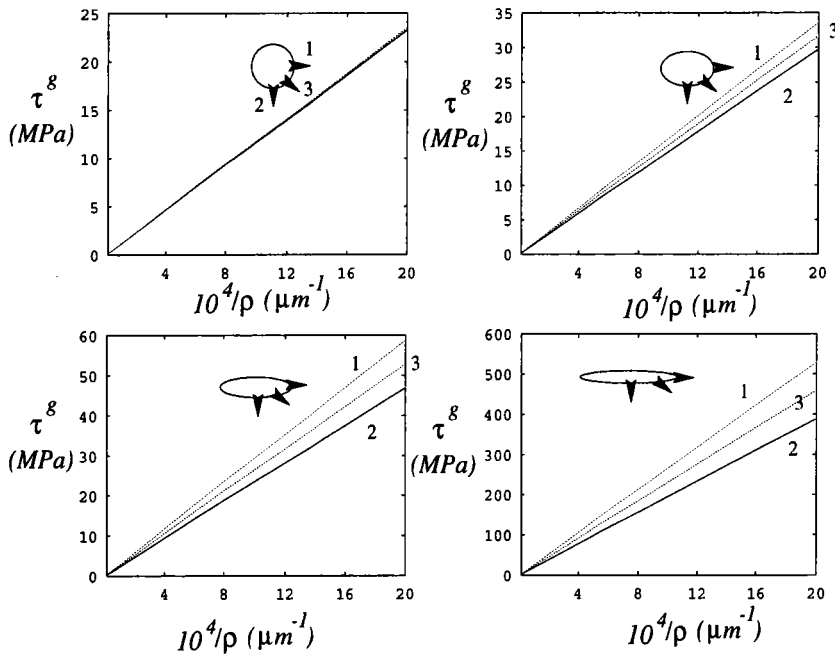


FIG. 15.8 – Evolution des cissions τ_i^g en fonction de l'inverse de la taille de grain a ou cellule $10^4\rho^{-1} = 10^4 d_{h,k,l}/a$ pour les trois cas étudiés. Le paramètre variable entre les différentes figures est la forme κ .

L'orientation de la direction de glissement par rapport au mouvement de la frontière mobile de l'inclusion a un effet non négligeable sur la relation microstructure-propriété (voir figure 15.8). En effet, si l'inclusion est proche d'une pièce de monnaie ($\kappa \gg 1$), l'orientation de la direction de glissement n'influence que peu τ^g de part le caractère isotrope plan de la forme de la boucle. Plus l'inclusion devient anisotrope ($\kappa > 1$), plus l'effet de l'orientation du glissement est significatif.

On montre ainsi que les relations de type Hall-Petch sont en réalité une interpolation de la dépendance générale de la cission critique avec la taille de la sous-structure. En fonction de l'intervalle des variables morphologiques dans lequel on se place, la dépendance sera linéaire avec l'inverse de la taille de la sous-structure, ou sera plus complexe, avec une forme probablement plus simple que celle obtenue dans ce travail, à savoir une forme Lna/a ou $1/aLna$, où Ln désigne le logarithme népérien [52].

Si on suppose que le boucle s'étend jusqu'à atteindre un obstacle de type mur d'une cellule de dislocations ou joint de grain, on peut aussi lui opposer un obstacle rigide du type de

ceux observés dans la perlite. Si l'espace entre obstacles est suffisamment petit pour interdire la formation de cellules de dislocations, une boucle va s'étendre comme décrit dans ce paragraphe, jusqu'à atteindre le mur rigide (effet géométrique) que représente l'interface ferrite/cémentite.

15.4 Effet de confinement - Morphologie lamellaire du grain

Pour appliquer cette étude au cas de l'expansion contrainte d'une boucle de dislocation entre deux murs rigides, l'approche adoptée est d'introduire une contrainte supplémentaire de type géométrique. En effet, les considérations énergétiques peuvent être couplées à la contrainte géométrique liée à l'espacement interlamellaire λ_p , soit :

$b = \frac{\lambda}{2}$, où λ est la projection de l'épaisseur de la lamelle, d'où :

$$\kappa = \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda}{2d_{h,k,l}}\right)^2 \rho^2} \quad (15.15)$$

Le nombre de variable interne au système est alors réduit à l'unité. Considérons ρ comme seule

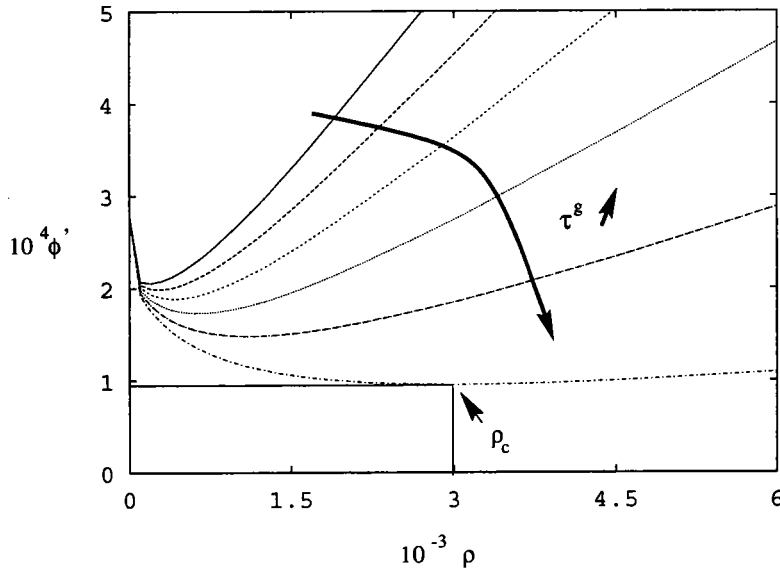


FIG. 15.9 – Evolution de l'énergie libre du système en fonction de ρ et pour τ^g variable. Ici, la forme est une cuvette désignant une position stable de la boucle, pour $\lambda_p = 0.1\mu m$, et $\eta = 45^\circ$.

variable morphologique. Il est important de noter ici qu'un des paramètres fixes lié au positionnement de l'ellipsoïde par rapport au plan des lamelles (ou l'angle entre plan de glissement et plan d'accolement des phases) est l'angle η (voir figure 15.10). Dans ce cas, l'espacement entre obstacles projeté dans le plan de glissement est : $\lambda = f\lambda_p/\sin\eta$ où f est la fraction volumique de la ferrite.

Il n'y a alors plus que la variable morphologique ρ dont dépend l'évolution de la boucle et l'énergie libre évolue avec ρ pour un plan de glissement faisant un angle de 45° avec l'interface inter-lamelle selon la figure 15.9.

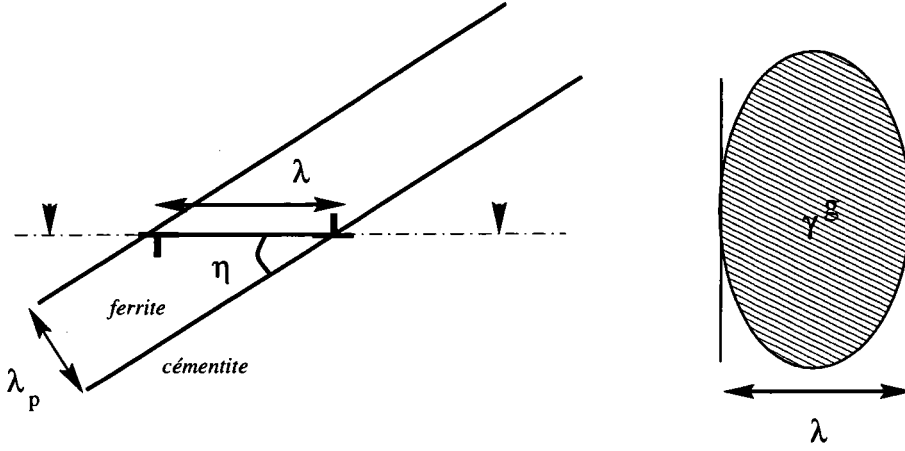


FIG. 15.10 – Représentation schématique de la géométrie et l'orientation de la boucle de dislocation par rapport au plan des lamelles.

L'évolution de la force motrice associée à la variable ρ est donnée figure 15.11. En annulant la force motrice associée à ρ , on obtient aisément l'expression de τ^g en fonction de l'inverse de l'espacement interlamellaire $1/\lambda_p$ (voir figure 15.12) pour diverses tailles d'îlot a .

La forme de l'énergie libre conduit à des positions stables de l'inclusion ellipsoïdale. On peut alors choisir un mécanisme de stockage de défauts associé à ce minimum d'énergie libre : par exemple, si on suppose qu'en atteignant le mur rigide (obstacle), la boucle de dislocation dépose deux branches le long des deux interfaces en vis-à-vis, on peut associer à chaque configuration stable de la boucle, une taille d'îlot pour la dimension critique $\rho_c = a_{\text{îlot}}/d_{h,k,l}$, et une cisssion critique τ_c^g pour laquelle une certaine densité de défaut est stockée aux interfaces. De la sorte, on associe une mesure de la contrainte sur le système de glissement considéré à l'anisotropie de forme du grain donc l'espace entre lamelles.

On montre ici que la relation microstructure/propriété reste linéaire entre limite locale d'écoulement τ_c^g et l'inverse de l'espacement entre lamelles λ_p pour des tailles de grain suffisamment grandes devant les valeurs prises par λ_p . L'expression de la cisssion critique $\tau_c^g(\lambda_p, a)$ est la suivante :

$$\begin{aligned} \tau_3^g(\lambda_p, a) = & \frac{\mu\gamma^g}{(1-\nu)\lambda_p} \frac{d_{h,k,l}^2}{64\lambda_p^2 a^2 (2\lambda_p^2 + a^2 (\cos(2\eta) - 1))} \left[\right. \\ & - d_{h,k,l} \sin(\eta) (2\lambda_p^2 (8\lambda_p^2 + a^2 (2(\frac{a}{d_{h,k,l}})^2 (2-\nu) - 3)) \\ & + a^2 (3a^2 + 2(2a^2 - \lambda_p^2 (3 + 2(\nu - 2)(\frac{a}{d_{h,k,l}})^2)) \cos(2\eta) \\ & + a^2 \cos(4\eta)) E(\lambda_p, \eta, a) + \lambda_p ((2\lambda_p^2 + a^2 (\cos(2\eta) - 1))^2 \\ & - 2d_{h,k,l} \lambda_p (4\lambda_p^2 ((\nu - 2)(\frac{a}{d_{h,k,l}})^2 - 1) \\ & \left. + a^2 (\cos(2\eta) - 1)) \sin(\eta) K(\lambda_p, \eta, a) \right] \end{aligned} \quad (15.16)$$

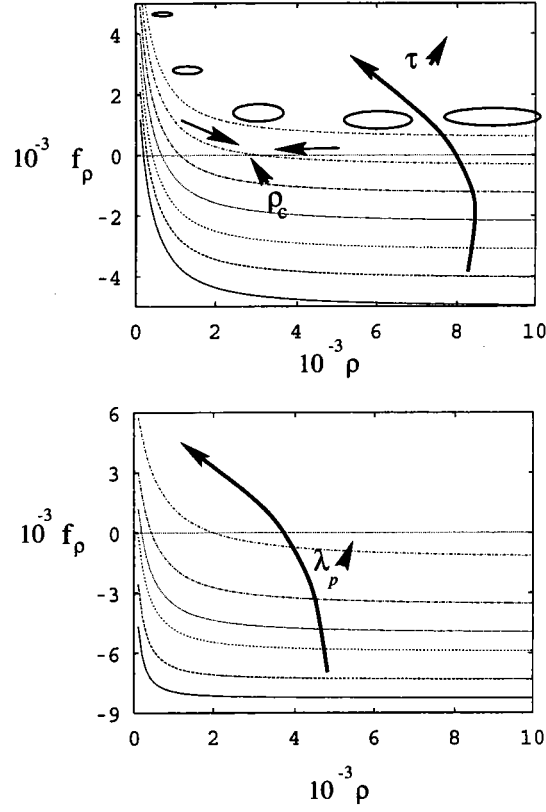


FIG. 15.11 – Evolution de la force motrice $f_\rho(\tau^g, \lambda_p)$ en fonction de ρ pour différentes valeurs de τ^g et λ_p .

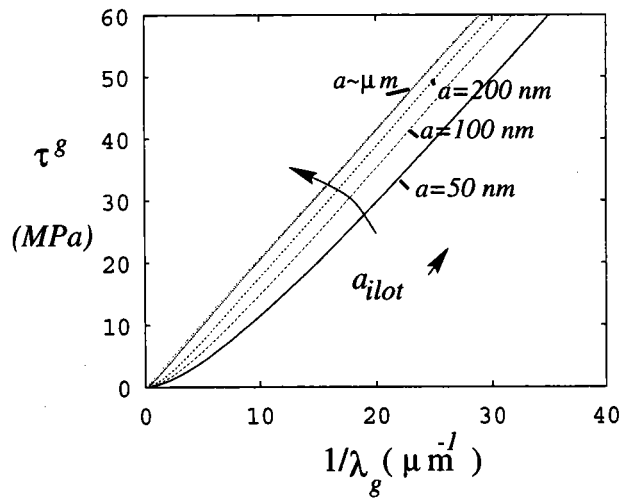


FIG. 15.12 – Evolution de la cission critique $\tau^g(\lambda_g)$ en fonction de λ_g^{-1} pour différentes valeurs de a_{ilot} .

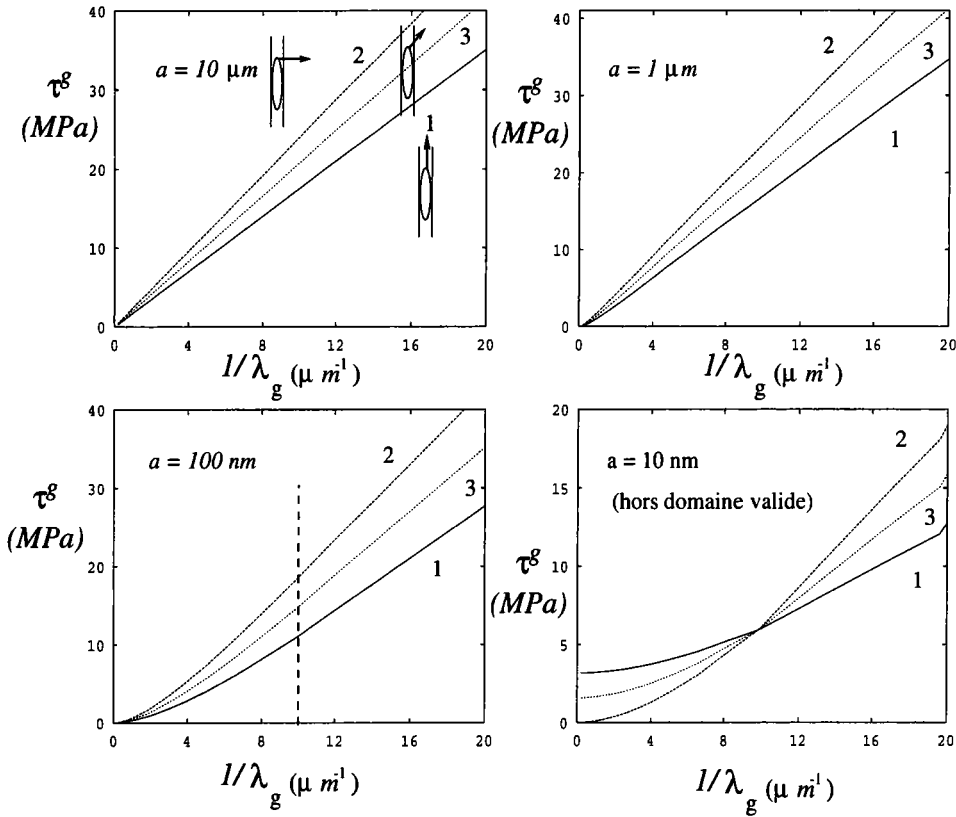


FIG. 15.13 – Evolution de la cisssion critique $\tau^g(\lambda_g)$ en fonction de λ_g^{-1} pour différentes valeurs de a_{tot} .

Pour diverses tailles de grain perlitique ou îlot a , on caractérise l'effet de l'orientation du glissement cristallographique. On montre ainsi qu'un système de glissement ayant une direction de glissement perpendiculaire au grand axe de l'ellipsoïde sera plus difficile à activer que dans le cas mixte (cas 3), lui-même plus difficile à activer que dans le cas d'une direction parallèle au grand axe de la boucle (cas 1). Ceci est vrai dans le domaine de validité des hypothèses, à savoir pour une taille de grain a suffisamment grande devant λ_p . Si cette hypothèse n'est pas vérifiée, la dépendance n'est plus linéaire (voir figure 15.13), et le résultat entre directions préférentielles de glissement s'inverse. Par comparaison avec la littérature, la pente trouvée $2 \text{ MPa} \cdot \mu\text{m}$ est d'un ordre de grandeur plus faible que les valeurs expérimentales de J. Gil Sevillano [52], soient :

- $65.6 \cdot \text{MPa} \cdot \mu\text{m}$ pour un acier eutectoïde commercial (contenant des éléments d'alliage) ;
- $46.4 \cdot \text{MPa} \cdot \mu\text{m}$ pour un acier eutectoïde binaire.

De même, Marder & al [44] trouvent une pente de $60.0 \text{ MPa} \cdot \mu\text{m}$. La pente que l'on obtient dans le modèle correspond à l'activation d'une source de dislocation à l'interface, et l'expansion de celle-ci dans la lamelle, jusqu'au stockage de deux branches sur les interfaces en vis-à-vis (par exemple). Elle n'est que de $2 \text{ MPa} \cdot \mu\text{m}$, soit plus de 10 fois inférieure aux valeurs mesurées. Si on prend l'estimation de Langford [4] (voir équation (3.1)), correspondant plus à un chargement du renfort intermétallique [2] qu'à l'empilement de dislocations, le facteur entre la valeur du modèle et $\mu b_{\text{Bürgers}}/3$ n'est plus que de 2.5 environ. Enfin, si on prend en compte le facteur d'orientation du plan de la boucle (plan de glissement), la pente locale de la loi de type Hall-Petch $\tau_c^g(\lambda_p)$ peut varier dans un intervalle plus grand.

15.5 Conclusion

Ce chapitre permet de caractériser un mécanisme de déformation lié à la présence d'interface-obstacles rigides, via le formalisme micromécanique d'Eshelby. Dans un premier temps, on décrit une sous-structure de dislocations connue pour se développer dans les métaux cubiques centrés. On établit ainsi une première relation entre cission critique locale d'écoulement τ_c^g sur un système de glissement donné g avec la taille de la sous-structure de dislocations, à savoir, la taille de cellule a (par exemple). On montre qu'il existe une relation linéaire entre τ_c^g et l'inverse de a dans un domaine de variation des paramètres morphologiques défini. La direction du glissement s^g est prise en compte et influence de façon notable la relation de type Hall-Petch obtenue.

Dans le cas d'une perlite fine ou une perlite fortement tréfilée, la présence de nombreuses interface-obstacles interdit la formation de telles sous-structures de grain, puisque le libre parcours moyen des dislocations est inférieur à la distance entre obstacles : on suppose alors qu'un mécanisme de non-empilement de dislocations -ou charge de fibre- a lieu.

Une deuxième étape dans ce chapitre permet de proposer un mécanisme de stockage de défauts à l'interface-obstacle, donnant lieu à une dépendance linéaire de la cission critique d'écoulement local τ_c^g sur un plan de glissement g en fonction de l'inverse de l'espacement entre obstacles (ou lamelles) λ_p . Comme il existe des relations d'orientation entre les monocristaux de part et d'autre de l'interface-obstacle, un facteur d'orientation ($\sin(\eta)$) détermine la valeur de la pente de type Hall-Petch. A ce stade, il est possible de caractériser l'effet de l'orientation du vecteur de Burgers par rapport au plan de l'interface. On trouve des valeurs de la pente de Hall-Petch en correspondance avec le mécanisme sous-jacent de charge des fibres.

Ce modèle permet de déterminer les propriétés intrinsèques des constituants de la perlite, puisque la forme lamellaire des grains affecte largement leur comportement, à cette échelle.

On a oublié ici un certain nombre de phénomènes significatifs (comme le frottement du réseau, l'interaction entre boucles et la nature semi-cohérente de l'interface qui la rend 'moins' rigide dans la réalité). Le but de cette étude est de caractériser l'anisotropie locale de comportement associée à la morphologie lamellaire des monocristaux constituant l'îlot perlitique. De la sorte, on peut associer à chaque constituant de la perlite des propriétés intrinsèques $\tau^g(\lambda_p)$, fonction de la géométrie du glissement ($\mathbf{m}^g, \mathbf{s}^g$) et des relations d'orientations entre phases à l'interface entre lamelles (η).

La description que l'on a faite, à cette échelle, des mécanismes élémentaires de déformation et donc des propriétés d'anisotropie locales du glissement cristallographique dans le composite lamellaire sera introduite dans la suite dans le comportement de l'îlot (chapitre 27). Il est en effet nécessaire, à ce stade, de décrire le comportement élastoplastique de chaque monocristal, à une échelle supérieure, qui est celle d'un grain monocristallin (de forme quelconque) supposé mésoscopiquement (quelques 100 nm) homogène.

Notations

Du fait de la formulation incrémentale, la notation suivante sera utilisée pour désigner l'incrément d'un tenseur ou d'un scalaire dans la configuration actuelle (κ_t) :

$$\delta_t$$

$\mathbf{F}$: tenseur gradient de transformation

$\mathcal{L}, \mathcal{M}, \mathbf{I}$: tenseur d'élasticité, tenseur des complaisances et tenseur identité

$d\boldsymbol{\tau}, d\mathbf{e}$: incréments de contrainte de Kirchhoff et de déformation d'Euler-Almansi

$\delta_t \gamma^h$: incrément de l'intensité de cisaillement du plan de glissement h à l'instant t

$\boldsymbol{\tau}, \mathbf{e}$: tenseurs contrainte de Kirchhoff et déformation d'Euler-Almansi

$\mathbf{g}$: tenseur gradient de vitesse de transformation

$\mathbf{w}$: partie antisymétrique

$\mathbf{d}$: partie symétrique

$\delta_t \boldsymbol{\pi}, \delta_t \mathbf{e}_o$: incréments du tenseur de contrainte de Piola-Kirchhoff II et de déformation de Green-Lagrange

$\delta_{Ja} \boldsymbol{\tau}, d$: incréments de Jaumann du tenseur de contrainte de Kirchhoff et incrément de déformation

$\delta_t \mathbf{n}, \mathbf{g}$: incrément du tenseur de contrainte nominale et gradient de vitesse

$\mathbf{p}^h, \boldsymbol{\omega}^h$: tenseur de Schmid symétrique et antisymétrique

$\boldsymbol{\lambda}^h, \boldsymbol{\mu}^h$: tenseur d'ordre 2 de Hill

$\mathbf{m}^h, \mathbf{s}^h$: normale au plan de glissement h et direction de glissement h

$\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\tau}, \mathbf{n}, \boldsymbol{\pi}$: tenseurs de contrainte de Cauchy, de Kirchhoff, nominale, de Piola-Kirchhoff II

τ^h : cission résolue sur le système de glissement h

$\mathcal{H}^{hg}, \mathcal{G}^{hg}$: éléments des matrices d'écrouissage du monocristal

$\hat{\mathbf{f}}, \mathbf{f}$: modules tangents élastoplastiques

Comportement élastoplastique des constituants de la perlite

Introduction

L'étude de la plasticité des métaux comprend en général plusieurs échelles. La première, macroscopique, relève de la théorie générale de la mécanique des solides. La formulation de lois générales ou globales dans ce cadre revêt un caractère pratique pour les problèmes d'ordre industriel.

La deuxième échelle est celle des mécanismes élémentaires de déformation qui conditionnent l'écoulement plastique dans la maille cristalline. Elle fait appel à l'étude fondamentale des interactions entre défauts, de leur création ou annihilation ou encore de la présence d'obstacles au mouvement de ces défauts. Pour simplifier, nous nous limiterons dans cette étude aux événements non-thermiquement activés produisant de la déformation plastique. De ce point de vue -soit à l'échelle du cristal- l'arrangement et l'évolution des défauts sont fonction de l'état interne du matériau qui évolue avec la déformation plastique. Les dislocations présentes dans le matériau, leur évolution statistique avec la déformation conditionnent clairement le comportement macroscopique du matériau monocristallin. Il est donc nécessaire de décrire aussi bien la distribution de ces défauts que leurs interactions le long du trajet de déformation.

Une solution est de considérer les plans de glissement des dislocations du cristal, et de leur associer les vecteurs de Burgers des diverses dislocations susceptibles de contribuer à l'écoulement plastique via un glissement local sur le plan considéré. La déformation plastique (ou plutôt son incrément) est alors fonction de la totalité des déformations de cisaillement local, mais aussi de leurs interactions, et de façon plus générale, de l'activité des défauts dans la structure cristalline considérée, soit l'activité plastique, à un instant donné du chargement. Pour un matériau déterminé, l'écoulement plastique dans le monocristal (ou grain) dépend essentiellement des contraintes ou déformations appliquées et de l'orientation de celles-ci par rapport à la cristallographie des systèmes de glissement. Dans le cas particulier d'un composite lamellaire comme la perlite, la forme du grain a aussi une incidence particulière sur le mouvement des défauts dans la matière (objet du chapitre précédent). Enfin, l'orientation initiale du grain (ou monocristal) est fondamentale dans l'étude de l'évolution de la structure cristalline, notamment sa rotation avec la déformation. En effet, le glissement plastique cristallographique ne modifie pas l'orientation du réseau cristallin, c'est la transformation élastique associée à l'incompatibilité plastique qui conditionne la rotation -élastique- de l'élément de volume, donc celle du réseau, dont elle représente une mesure. Il est donc possible de suivre l'évolution de la rotation du cristal au cours d'une sollicitation, et ainsi de définir les textures de déformation du matériau réel, après un processus d'homogénéisation approprié (objet du chapitre suivant).

Ce chapitre a pour objectif la formulation d'une loi élastoplastique tangente en transformation finie, basée essentiellement sur les travaux de Hill et Rice [80], Asaro [79], et Berveiller et

Lipinski [23](etc.). Après avoir défini le cadre général de la description (voir les deux paragraphes suivants), la cinématique eulérienne permet de définir la variable cinématique objective associée à la loi de comportement. A cette grandeur thermodynamique, on associe la variable associée (objective) qui est décrite dans la partie efforts. Loin d'être trivial, le choix de la vitesse de contraintes associée au gradient de vitesses de transformation revêt un caractère fondamental, puisqu'il est nécessaire de distinguer le comportement du réseau cristallin de celui de la matière, et de définir un repère pour le mouvement du réseau. Le comportement plastique du monocristal est ensuite décrit en terme de taux de déformation plastique et de règle de normalité. On associe à ce dernier les variables cachées (locales) vitesses de glissement, qui nécessitent des lois complémentaires d'évolution. La construction d'une loi d'écrouissage, dont la matrice des modules d'écrouissage sert de base à une discussion sur la stabilité de l'écoulement plastique, permet alors de faire évoluer ces variables internes. On y voit aussi les effets de la formulation en transformation finie, qui donne les conditions de convergence de la solution en vitesses de glissement local. Enfin, la construction des modules tangents élastoplastiques fait l'objet d'une discussion sur l'approche proposée par Iwakuma et Nemat-Nasser [85]. On discute aussi de la stabilité de la solution, selon le critère énergétique proposé par Franciosi [84]. Après la réactualisation des variables, prévue dans la démarche incrémentale quelques résultats sont regroupés dans la septième partie de ce chapitre. La loi élastoplastique -une fois choisie- fait l'objet de deux applications, l'une déjà largement étudiée, celle du comportement de la ferrite cubique centrée, et l'autre, plus originale, touche au comportement de la cémentite, composé intermétallique métastable, de structure orthorhombique, qui constitue le renfort du composé perlitique.

On suppose que le repère directeur de Mandel est attaché au réseau cristallin.

16.1 Description du Mouvement

Le mouvement d'un solide déformable est décrit par la fonction de transformation :

$$\begin{aligned}\kappa_o &\rightarrow \kappa_t \\ \mathbf{X} &\mapsto \mathbf{x} \\ x_i &= x_i(X_J, t)\end{aligned}$$

où :

$\mathbf{x}$ est la position courante de la particule à l'instant t dans la configuration actuelle (κ_t);

$\mathbf{X}$ est la position qu'occupait la particule avant déformation, dans la configuration de référence (κ_o).

Le choix de la configuration de référence est libre, mais la détermination du mouvement des solides déformables est plus ou moins commode en fonction de ce choix. Il est nécessaire de traiter séparément les deux systèmes d'axes ($x_i, i = 1, 3$) et ($X_i, i = 1, 3$). Ils sont orthonormés (confondus dans le cas des petites perturbations), et il est fondamental de distinguer :

X_I coordonnées lagrangiennes dans (κ_o);

x_i coordonnées eulériennes dans (κ_t).

En introduisant le vecteur déplacement $\mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$, le mouvement du solide peut être décrit par :

$$\mathbf{x} = \mathbf{X} + \mathbf{u}(\mathbf{X}, t) \quad (16.1)$$

On définit une configuration intermédiaire (κ_p) (ou relâchée, voir figure 16.1) de sorte que le tenseur $\mathbf{F}$ possède la forme :

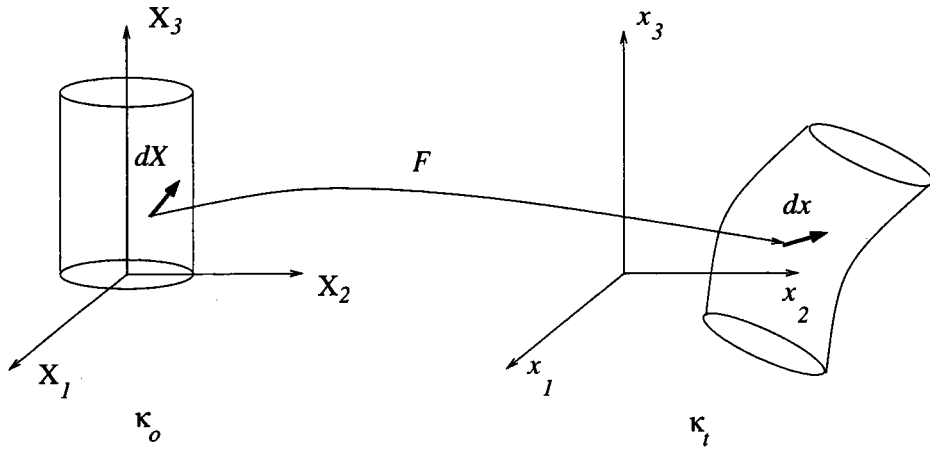
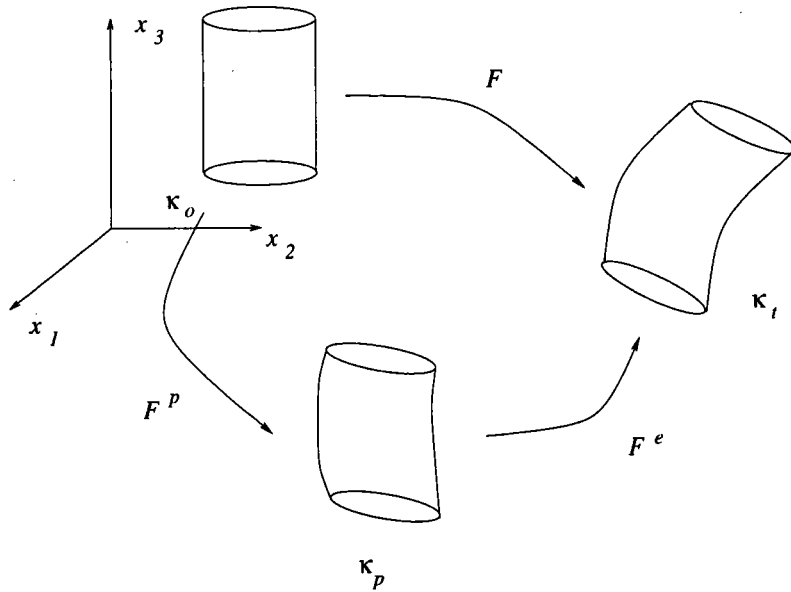


FIG. 16.1 – Déformation d'un solide

$$\mathbf{F}(t) = \mathbf{F}^e(t) \cdot \mathbf{F}^p(t) \quad (16.2)$$


FIG. 16.2 – Décomposition du gradient de transformation $\mathbf{F}$: trois configurations du solide sont représentées, κ_0 correspond à la configuration de référence, κ_t représente la configuration actuelle du solide et κ_p est la configuration intermédiaire ou relâchée.

La formulation proposée suit une description eulérienne du comportement du solide, définissant le module tangent du monocristal. Dans ce cadre, une approche incrémentale est courante : tous les tenseurs de vitesses utilisés dans la suite seront définis sous leur forme incrémentale.

16.2 Choix du modèle

Le cadre de ce modèle est la théorie du glissement multiple homogène et continu ; l'inélasticité du matériau a pour origine le mouvement des dislocations non thermiquement activé, négligeant les phénomènes de maclage, diffusion (montée des dislocations) et changements de phase. L'objectif de ce travail est de décrire les propriétés mécaniques d'un matériau cristallin élastique-plastique, à l'échelle macroscopique. Les hypothèses posées sont :

- la distorsion du réseau est élastique, et sa déformation faible ;
- le cristal se déforme par glissement multiple selon des plans et des directions cristallins propres au réseau atomique ;
- de tels systèmes de glissement sont potentiellement actifs si les cissions correspondantes atteignent des valeurs critiques, fonction de l'histoire du cristal.

Les deux premiers points donnent la 'structure' du matériau, propre à chaque constituant de la perlite, dont la principale caractéristique ici étudiée est l'anisotropie cristalline (on suppose l'élasticité isotrope, ce qui est admissible pour des structures cubiques type ferrite). Le dernier point met en évidence la nécessité de définir une loi d'évolution de seuils d'activation des phénomènes inélastiques, ici restreints au mouvement des dislocations. La loi d'écrouissage résulte des conditions d'interactions entre dislocations, selon le modèle proposé par Franciosi [84] (voir paragraphe 20.2).

La formulation proposée suit essentiellement les travaux de Hill et Rice [81, 82, 80], puis Asaro [79], suivis par Lipinski, Berveiller [23] etc... On part du choix arbitraire de la mesure de déformation $\mathbf{e}$ définie dans un état de référence donné du solide (ou grain). La mesure conjuguée de contrainte $\boldsymbol{\tau}$, dans l'état déformé, est définie par la représentation thermodynamique du travail par unité de masse, soit $\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\tau} : d\mathbf{e}$, pour un incrément de déformation $d\mathbf{e}$ quelconque (ρ est la densité de la matière dans l'état de référence). Associés à la paire $(\boldsymbol{\tau}, \mathbf{e})$, on définit le comportement élastique instantané du matériau lors d'un chargement, par les tenseurs d'ordre 4 des modules d'élasticité $\mathcal{L}$ et de complaisances $\mathcal{M}$. Si on suppose que le seul mécanisme responsable du comportement inélastique est le glissement cristallographique, on peut écrire à température constante :

- pour un incrément de contraintes $\mathcal{L} : d\mathbf{e} - d\boldsymbol{\tau} = \sum_h \lambda^h d\gamma^h$;
- pour un incrément de déformation $d\mathbf{e} - \mathcal{M} : d\boldsymbol{\tau} = \sum_h \mu^h d\gamma^h$.

avec

$$\begin{aligned}\lambda^h &= \mathcal{L} : \mu^h \\ \mu^h &= \mathcal{M} : \lambda^h\end{aligned}\tag{16.3}$$

et $d\gamma^h$ est l'incrément d'intensité de glissement dans la configuration actuelle du système de glissement h actif ^{16,17}. Pour cela, il est nécessaire de faire le choix des variables thermodynamiques associées, soient $\boldsymbol{\tau}$ la contrainte et $\mathbf{e}$ la déformation. Hill & al.[80] montrent que si on choisit pour $\boldsymbol{\tau}$ le tenseur des contraintes de Kirchhoff, et pour $\mathbf{e}$ le tenseur d'Euler-Almansi, le

¹⁶Il est courant de traiter le cas de l'élasticité linéaire et de la considérer non affectée par le glissement ; c'est le cas de l'approximation usitée 'petites déformations'. En conséquence, la géométrie du réseau cristallin est indépendante du cisaillement. On ignore ainsi la rotation du réseau par rapport à la matière, induite par le glissement.

¹⁷ $\sum_h \mu^h d\gamma^h$ est le résidu d'incrément de déformation après un cycle charge-décharge infinitésimale de la contrainte $\boldsymbol{\tau}$. $\sum_h \lambda^h d\gamma^h$ est le résidu décremental de la contrainte $\boldsymbol{\tau}$ après un tel cycle de déformation. μ^h est donc lié à la mesure de contrainte $\boldsymbol{\tau}$, alors que λ^h est associée à la mesure de déformation $\mathbf{e}$.

choix de l'incrément du gradient relatif des vitesses $\mathbf{g}$ conduit à un incrément de contraintes associé différent de celui de Jauman de la contrainte de Kirchhoff dans le cas général. L'incidence du choix de l'incrément de contraintes est probablement faible sur le comportement global du monocristal (au moins jusqu'à des déformations de l'ordre de dizaines de pour-cent), mais ce choix est essentiellement basé sur la physique de la déformation et la définition du glissement plastique. L'approche de Iwakuma/Nemat-Nasser [85] propose d'associer au repère de Mandel un mouvement de rotation élastique, dépendant de la partie élastique du gradient des vitesses. En effet, il est raisonnable de supposer que le réseau cristallin n'est pas (ou peu) affecté par le glissement plastique, et le spin du réseau $\mathbf{w}^*$ peut alors être associé (égal) à la partie élastique antisymétrique du gradient des vitesses $\mathbf{w}^e$.

Cinématique

Dans la démarche qui suit, la configuration de référence est attachée à la configuration actuelle, et la description est incrémentale. Dans ce cas, le gradient des vitesses de transformation relative par rapport à (κ_t) , noté $\mathbf{g}$ est défini par :

$$\begin{aligned}\mathbf{g}(t) &= \delta_t \mathbf{F}(t) : \mathbf{F}^{-1}(t) \\ &= \delta_t \mathbf{F}_t(t)\end{aligned}\tag{17.1}$$

où $\mathbf{F}$ est le gradient de transformation de (κ_o) dans (κ_t) , et $\mathbf{F}_t$ le gradient relatif de transformation dans (κ_t) [99]. En introduisant le taux de transformation $\mathbf{v}(t)$:

$$\mathbf{v}(t) = \delta_t \mathbf{x}(\mathbf{X}, t)\tag{17.2}$$

on montre que :

$$\mathbf{g}(t) = \frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}}\tag{17.3}$$

Si on applique le théorème de la décomposition polaire de Cauchy au gradient de transformation relative, on peut écrire :

$$\mathbf{F}_t = \mathbf{R}_t \cdot \mathbf{U}_t = \mathbf{V}_t \cdot \mathbf{R}_t\tag{17.4}$$

où $\mathbf{R}_t$ désigne une rotation, et $\mathbf{U}_t$ (ou $\mathbf{V}_t$) une déformation pure. L'incrément du gradient relatif $\mathbf{F}_t$ est alors, selon (17.4) :

$$\begin{aligned}\mathbf{g} &= \delta_{\mathcal{T}} \mathbf{F}_t(\mathbf{x}, \mathcal{T})|_{\mathcal{T}=t} \\ &= \delta_{\mathcal{T}}(\mathbf{R}_t) \cdot \mathbf{U}_t + \mathbf{R}_t \cdot \delta_{\mathcal{T}}(\mathbf{U}_t)|_{\mathcal{T}=t}\end{aligned}\tag{17.5}$$

soit, en prenant $\mathcal{T} = t$, $\mathbf{F}_t = \mathbf{1} \Rightarrow \mathbf{U}_t = \mathbf{R}_t = \mathbf{1}$, et l'équation (17.5) prend la forme :

$$\mathbf{g} = \delta_{\mathcal{T}} \mathbf{R}_t|_{\mathcal{T}=t} + \delta_{\mathcal{T}} \mathbf{U}_t|_{\mathcal{T}=t} = \mathbf{w} + \mathbf{d}\tag{17.6}$$

où -comme la décomposition en partie symétrique et antisymétrique d'un tenseur est unique- $\mathbf{d}$ et respectivement $\mathbf{w}$, est l'incrément de déformation et respectivement, l'incrément de rotation. Ils sont définis par les relations :

$$\begin{aligned}\mathbf{d} &= \frac{1}{2}(\mathbf{g} + {}^t\mathbf{g}) \\ \mathbf{w} &= \frac{1}{2}(\mathbf{g} - {}^t\mathbf{g})\end{aligned}\tag{17.7}$$

Le tenseur $\mathbf{g}$ défini ainsi correspond bien à l'incrément recherché dans la formulation qui suit. On supposera que le solide soumis à une sollicitation extérieure, évolue de façon quasi-statique, d'un état d'équilibre à un autre, de sorte à rendre admissible cette approche.

La loi de comportement élastique du matériau dans la configuration actuelle (κ_t) est déterminée selon une formulation eulérienne, et doit vérifier le principe d'objectivité. Il en est de même pour le tenseur taux de déformation que nous allons maintenant déterminer. Dans la configuration de référence (κ_o) , une décomposition additive lagrangienne donne l'incrément du tenseur de déformation de Green-Lagrange, $\delta_t \mathbf{e}_o (= \delta_t \mathbf{e}_o^e)$ pour un tel cycle de la contrainte associée, représentée par le tenseur de Piola-Kirchhoff 2 $\delta_t \boldsymbol{\pi}$:

$$\delta_t \mathbf{e}_o^e = \mathcal{M}_o : \delta_t \boldsymbol{\pi} \quad \text{dans } (\kappa_o) \quad (17.8)$$

où $\mathcal{M}_o$ est le tenseur des complaisances dans la configuration de référence. En multipliant à gauche la relation (17.8) par le tenseur des modules d'élasticité, on obtient la loi de Hooke :

$$\delta_t \boldsymbol{\pi} = \mathcal{L}_o : \delta_t \mathbf{e}_o^e \quad \text{dans } (\kappa_o) \quad (17.9)$$

avec $\mathcal{L}_o : \mathcal{M}_o = \mathcal{I}$. Pour écrire la loi (objective) équivalente dans la configuration actuelle (κ_t) , il est nécessaire de transporter les tenseurs de la configuration de référence dans la configuration actuelle selon la relation :

$$\mathbf{dx} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{dX} \quad (17.10)$$

On définit alors la partie symétrique $\mathbf{d}$ du tenseur gradient de vitesses telle que :

$$\begin{aligned} \delta_t(\delta \mathbf{x} \cdot \mathbf{e} \cdot \delta \mathbf{y}) &= \delta_t(\mathbf{dX} \cdot \mathbf{e}_o \cdot \mathbf{dY}_o) \\ &= \delta \mathbf{x} \cdot \mathbf{d} \cdot \delta \mathbf{y} \end{aligned} \quad (17.11)$$

et on montre que ce tenseur $\mathbf{d}$ est objectif (et non $\delta_t \mathbf{e}$) et vérifie :

$$\mathbf{d} = {}^t \mathbf{F}^{-1} \cdot \delta_t \mathbf{e}_o \cdot \mathbf{F}^{-1} \quad (17.12)$$

$$= \delta_t \mathbf{e} + {}^t \mathbf{g} \cdot \mathbf{e} + \mathbf{e} \cdot \mathbf{g} \quad (17.13)$$

dans la configuration actuelle (κ_t) , où $\delta_t \mathbf{e}$ est l'incrément du tenseur d'Euler Almansi (non objectif). Ce tenseur $\mathbf{d}$ doit être thermodynamiquement associé à un incrément de contrainte objectif que nous allons définir.

Variable associée à $\mathbf{d}$

Les déformations infinitésimales (incrémentales) d'un solide élastoplastique soumis à une déformation finie donnée, satisfont la propriété d'additivité si on utilise la même mesure de l'incrément de déformation (dans la configuration actuelle) pour définir les incréments de déformation totale, élastique et plastique. Si on suppose un comportement purement élastique, alors la décomposition additive de Green-Lagrange donne :

$$\begin{aligned}\delta_t \mathbf{e}_o &= \delta_t \mathbf{e}_o^e \quad \text{dans } (\kappa_o) \\ {}^t\mathbf{F}^{-1} \cdot \delta_t \mathbf{e}_o \cdot \mathbf{F}^{-1} &= \mathbf{d}^e \quad \text{dans } (\kappa_t)\end{aligned}\tag{18.1}$$

où $\mathbf{d}^e$ est la partie élastique du gradient symétrique des vitesses. Il est possible alors d'écrire une loi de Hooke dans la configuration actuelle :

$$\mathbf{d}^e = \mathcal{M} : \delta_{Tr} \boldsymbol{\sigma} \tag{18.2}$$

où $\mathcal{M}_{ijkl} = F_{io}^{-1} F_{jp}^{-1} F_{km}^{-1} F_{ln}^{-1} \mathcal{M}_{opmn}^o$ et $\delta_{Tr} \boldsymbol{\sigma}$ est un incrément de contrainte à définir.

A ce stade de la description, il est important de choisir un repère directeur, nécessaire dans la détermination de la vitesse de déformation élastique $\mathbf{d}^e$. De manière naturelle (Mandel), la partie élastique du gradient des vitesses $\mathbf{g}^e(\mathbf{x}, t)$ caractérise le mouvement du réseau cristallographique au cours du chargement. La distorsion du réseau est alors associée au gradient $\mathbf{g}^*$ des vitesses du réseau atomique, soient $\mathbf{w}^*$, sa vitesse de rotation (antisymétrique), et $\mathbf{d}^*$ sa vitesse de déformation.

Afin de déterminer l'incrément de contraintes associé à $\mathbf{d}^*$, Hill [83] propose le critère d'invariance du travail extérieur. L'incrément des contraintes recherché est alors l'incrément de Truesdell des contraintes de Cauchy, ou incrément des contraintes de Kirchhoff dans la configuration actuelle (κ_t) par rapport à un référentiel animé d'un mouvement élastique de réseau représenté par $\mathbf{g}^*$. Selon les hypothèses généralement admises, l'incrément de contrainte le plus adapté est celui associé à la dérivée corotationnelle de la contrainte de Kirchhoff, ou dérivée de Jauman de la contrainte de Kirchhoff [79]. En effet, si on part de la définition du mouvement de rotation du réseau cristallin, conditionné par le tenseur $\mathbf{w}^*$, les vecteurs direction de glissement (matériel) $\mathbf{m}^g$ et normale au plan de glissement $\mathbf{s}^g$ sont incrémentés pour un système de glissement g selon :

$$\begin{aligned}\delta_t \mathbf{m}^g &= \mathbf{w}^* \cdot \mathbf{m}^g \\ \delta_t \mathbf{s}^g &= \mathbf{w}^* \cdot \mathbf{s}^g\end{aligned}\tag{18.3}$$

Ces relations garantissent l'orthogonalité entre les vecteurs $\mathbf{m}^g$ et $\mathbf{s}^g$, et non leur normalité¹⁸. Dans ce cas :

$$\delta_{Ja}^* \tau = \delta_t \tau - \mathbf{w}^* \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot {}^t \mathbf{w}^* \quad (18.4)$$

où $\delta_t \tau$ est l'incrément des contraintes de Kirchhoff, et la loi de Hooke dans (κ_t) est :

$$\delta_{Ja}^* \tau = \mathcal{L} : \mathbf{d}^* \quad (18.5)$$

avec $\delta_{Ja}^* \tau$ l'incrément de Jauman de la contrainte de Kirchhoff. Cette dernière relation est très proche de celle utilisée par Hill et Rice [80]. En effet, par définition, la dérivée de Truesdell de la contrainte de Cauchy adopte pour expression :

$$\delta_{Tr}^* \boldsymbol{\sigma} = \delta_t \boldsymbol{\sigma} - \mathbf{g}^* \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot {}^t \mathbf{g}^* \quad (18.6)$$

dans ce cas, l'écart entre les deux incréments de contrainte est :

$$\delta_{Tr}^* \boldsymbol{\sigma} - \delta_{Ja}^* \tau = -\mathbf{d}^* \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d}^* \quad (18.7)$$

qui reste faible selon les hypothèses du modèle. La suite de cette formulation se base sur l'équation (18.5), et l'utilisation de la dérivée de Jaumann des contraintes de Kirchhoff comme variable thermodynamique associée à la vitesse de déformation $\mathbf{d}^*$. Après avoir décrit le comportement élastique tangent du monocristal dans la configuration actuelle (κ_t) , il est nécessaire de lui associer le comportement plastique, responsable de la non-linéarité de la réponse du matériau à une sollicitation quelconque.

¹⁸Il suffit d'écrire : $\mathbf{s}_{\kappa_t}^g = \mathbf{R}^* \cdot \mathbf{s}_{\kappa_0}^g$ et $\mathbf{m}_{\kappa_t}^g = \mathbf{m}_{\kappa_0}^g \cdot \mathbf{R}^{*-1}$, et de dériver dans le repère matériel associé à (κ_t) , pour trouver la relation (18.3). De plus, si $\mathbf{m}_{\kappa_0}^g \cdot \mathbf{s}_{\kappa_0}^g = 0$, alors $\mathbf{m}_{\kappa_t}^g \cdot \mathbf{s}_{\kappa_t}^g = \mathbf{m}_{\kappa_0}^g \cdot \mathbf{R}^{*-1} \cdot \mathbf{R}^* \cdot \mathbf{s}_{\kappa_0}^g = \mathbf{m}_{\kappa_0}^g \cdot \mathbf{s}_{\kappa_0}^g = 0$, car $\mathbf{R}^*$ est orthogonale.

Comportement plastique du monocristal

La description lagrangienne réactualisée¹⁹, dans laquelle la configuration actuelle est choisie comme configuration de référence, fait intervenir le gradient relatif des vitesses $\mathbf{g} = \delta_t \mathbf{F}_t$, dont la partie symétrique $\mathbf{d}$ représente la vitesse de déformation. Avec cette dernière et l'incrément de Jauman des contraintes de Kirchhoff, il est possible selon (18.5) de définir la partie plastique du gradient des vitesses $\mathbf{g}^p$.

19.1 Définition du taux de déformation plastique $\mathbf{d}^p$

Lors d'un cycle charge-décharge en contrainte, l'incrément de déformation issu du glissement est directement fonction du taux de cisaillement local, noté $\delta_t \gamma^h$ sous forme incrémentale, selon l'équation :

$$\begin{aligned} \mathbf{d}^p &= \mathbf{d} - \mathcal{M} : \delta_{Ja} \boldsymbol{\tau} \\ &= \sum_h \boldsymbol{\mu}^h \delta_t \gamma^h \\ \Rightarrow \mathcal{L} : \mathbf{d}^p &= \mathcal{L} : \mathbf{d} - \delta_{Ja} \boldsymbol{\tau} \\ &= \sum_h \boldsymbol{\lambda}^h \delta_t \gamma^h \end{aligned} \tag{19.1}$$

où le tenseur d'ordre 2 $\boldsymbol{\mu}^h$ -lié à la partie symétrique du tenseur de Schmid ($m_i s_j$)- est à déterminer.

19.2 Détermination des tenseurs $\boldsymbol{\mu}^h$ et $\boldsymbol{\lambda}^h$

Classiquement, le gradient de vitesses du réseau cristallin se décompose en une partie symétrique $\mathbf{d}^* = \frac{1}{2}(\mathbf{g}^* + {}^t \mathbf{g}^*)$, et une partie antisymétrique $\mathbf{w}^* = \frac{1}{2}(\mathbf{g}^* - {}^t \mathbf{g}^*)$:

¹⁹Cette description n'est ni lagrangienne, ni eulérienne, puisqu'elle se place dans la configuration actuelle qui est aussi la configuration de référence. Le qualificatif 'lagrangienne' restitue la notion de 'référence', et 'actualisée' à l'état 'actuel' du solide.

$$\mathbf{g}^* = \mathbf{d}^* + \mathbf{w}^* \quad (19.2)$$

D'après Taylor[26], le taux de transformation relatif au réseau atomique est lié au glissement cristallographique selon :

$$\begin{aligned} \mathbf{g} - \mathbf{g}^* &= \sum_h \mathbf{s}^h \delta_t \gamma^h \\ \mathbf{d} - \mathbf{d}^* &= \sum_h \mathbf{p}^h \delta_t \gamma^h \\ \mathbf{w} - \mathbf{w}^* &= \sum_h \boldsymbol{\omega}^h \delta_t \gamma^h \\ \delta_{Ja} \boldsymbol{\tau} - \delta_{Ja}^* \boldsymbol{\tau} &= \sum_h \boldsymbol{\alpha}^h \delta_t \gamma^h \end{aligned} \quad (19.3)$$

avec $s_{ij}^h = m_i^h s_j^h$ dans la configuration actuelle, où le vecteur unitaire $\mathbf{m}^h$ est la direction de glissement, et $\mathbf{s}^h$ le vecteur normal (unitaire) au plan de glissement du système h . Les tenseurs $\mathbf{p}^h$ et $\boldsymbol{\omega}^h$ sont les parties symétrique et respectivement antisymétrique du tenseur de Schmid $\mathbf{s}^h$. On montre alors, selon (18.4) que :

$$\boldsymbol{\alpha}^h = -\boldsymbol{\omega}^h \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot {}^t \boldsymbol{\omega}^h \quad (19.4)$$

Pour déterminer le taux de déformation plastique $\mathbf{d}^p$, il est nécessaire de connaître le tenseur $\boldsymbol{\mu}^h$, en général différent de $\mathbf{p}^h$. Dans ce but, Hill et Rice [80] définissent le comportement élastique objectif du réseau cristallin, affecté par le glissement plastique selon :

$$\delta_{Ja}^* \boldsymbol{\tau} - \mathcal{L} : \mathbf{d}^* = \sum_h \boldsymbol{\beta}^h \delta_t \gamma^h \quad (19.5)$$

où $\boldsymbol{\beta}^h$ décrit l'effet du glissement plastique sur le comportement du cristal, en général négligeable. Comme

$$\mathcal{L} : \mathbf{d} - \delta_{Ja} \boldsymbol{\tau} = \sum_h \boldsymbol{\lambda}^h \delta_t \gamma^h \quad (19.6)$$

on résoud le système (19.5,??) pour obtenir les relations :

$$\begin{aligned} \mathcal{L} : \mathbf{p}^h - \boldsymbol{\alpha}^h &= \boldsymbol{\lambda}^h + \boldsymbol{\beta}^h \\ \Leftrightarrow \mathbf{p}^h - \mathcal{M} : \boldsymbol{\alpha}^h &= \boldsymbol{\mu}^h + \mathcal{M} : \boldsymbol{\beta}^h \end{aligned} \quad (19.7)$$

On considère que le comportement élastique du réseau est peu affecté par le glissement plastique²⁰, soit $\boldsymbol{\beta}^h = \mathbf{0}$, et les deux tenseurs recherchés adoptent la forme :

²⁰NB : On peut supposer que les liaisons entre atomes ne sont pas affectées sur l'ensemble du cristal.

$$\begin{aligned}\lambda^h &= \mathcal{L} : \mathbf{p}^h + \omega^h \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \omega^h \\ \mu^h &= \mathbf{p}^h + \mathcal{M} : (\omega^h \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \omega^h)\end{aligned}\quad (19.8)$$

L'hypothèse sous-jacente à la relation $\beta^h = 0$ permet de définir le comportement élastique de la matière (ou du solide) comme étant celui attaché au réseau cristallin : il est alors possible d'écrire,

$$\mathbf{w}^* = \mathbf{w}^e$$

Dans ce cas, on montre qu'en général le tenseur symétrique de la partie plastique du gradient $\mathbf{d}^p$ est différent de l'expression usuelle $\sum_h \mathbf{p}^h \delta_t \gamma^h$ par des termes de convection négligeables aux petites déformations (contraintes), mais qui peuvent devenir importants en transformations finies [91].

Remarques sur la formulation d'Iwakuma et Nemat-Nasser [85]

Asaro [79] montre que l'expression $\mathbf{p}^h \delta_t \gamma^h$ pour l'incrément $\mathbf{d}^p$, ne vérifie pas la règle de normalité, et que c'est bien le tenseur $\mathbf{d}^p = \mu^h \delta_t \gamma^h$ qui est normal à la surface de charge dans l'espace de contraintes, pour un matériau métallique par exemple.

La détermination de ce tenseur inélastique est fonction de l'activité de glissement des systèmes inhérents au matériau, à travers les variables cachées $\delta_t \gamma^h$. Qu'un système s'active -autorise le mouvement de dislocations- est fonction non seulement de la géométrie de la structure par rapport à la sollicitation, mais aussi de la force motrice associée à un tel événement. Il est donc nécessaire d'établir un critère permettant de différencier l'activité plastique potentielle ou non de chaque système de glissement h au temps t et de lui associer une grandeur thermodynamique pertinente, afin de déterminer l'intensité du cisaillement local en fonction de la vitesse de déformation.

19.3 Règle de normalité

A chaque histoire de déformation du matériau, on suppose qu'il existe une surface de charge dans l'espace des contraintes ou des déformations. Prenons l'espace des contraintes, et supposons que l'état de contrainte actuel est en un point de la surface ou une certaine histoire de la déformation a lieu, produisant un incrément de déformation plastique $\mathbf{d}^p$. Si $\delta_{J_a}^* \boldsymbol{\tau}$ représente un incrément quelconque partant de cet état de contrainte, mais dirigé vers l'intérieur de la surface de charge, et si :

$$\delta_{J_a}^* \boldsymbol{\tau} : \mathbf{d}^p < 0 \quad (19.9)$$

pour tout $\delta_{J_a}^* \boldsymbol{\tau}$, alors l'incrément $\mathbf{d}^p$ est normal à la surface de charge. Cette relation est équivalente, d'après (19.1) à :

$$\delta_{J_a}^* \boldsymbol{\tau} : \mu^h < 0 \quad (19.10)$$

- où la convention $\delta_t \gamma^h > 0$ est utilisée -, ou encore :

$$\lambda^h : \mathbf{d}^* < 0 \quad (19.11)$$

Ce critère se transforme successivement en :

$$\begin{aligned} \delta_t^* \tau^h &= \mu^h : \delta_{Ja}^* \tau < 0 \\ \mu^h : (\delta_t \sigma + \sigma \text{tr}(\mathbf{d}^*) + \sigma \cdot \mathbf{w}^* - \mathbf{w}^* \cdot \sigma) &< 0 \end{aligned}$$

d'après (19.7) et pour $\beta^h = \mathbf{0}$. Il est possible d'obtenir la même relation en définissant l'incrément de contraintes résolues $\delta_t^* \tau^h$ selon :

$$\delta_t^* \tau^h = \delta_t (m_i^h s_j^h \tau_{ij}) < 0 \quad (19.12)$$

où τ_{ij} est le tenseur des contraintes de Kirchhoff, et étant donnée l'évolution des vecteurs du réseau, donnée par (18.3). Ainsi, l'incrément de contraintes résolues $\delta_t^* \tau^h$ -fonction de la géométrie de glissement du matériau, de son état de contraintes et des termes de convection propres à la formulation en transformation finie- est la force motrice choisie pour établir un critère d'écoulement.

Le critère de déchargement proposé définit bien l'ensemble des systèmes inactifs à t , pour un comportement purement plastique. Dans le cas élastoplastique, l'ensemble systèmes inactifs (ou latents) est composé :

- des systèmes inactifs à t (non potentiels) : $\tau^h < \tau_c^h$;
- des systèmes potentiels à t : $\tau^h(t) = \tau_c^h(t)$, qui sont non potentiels à $t + dt$: $\delta_t^* \tau^h < \delta_t^* \tau_c^h$ à t .

Ici, τ^h est l'intensité de la cission résolue sur le système et de glissement h , dont l'expression est donnée dans l'équation (19.12), et qui peut se réduire à :

$$\tau^h = \mathbf{p}^h : \tau \quad (19.13)$$

où τ est le tenseur des contraintes de Kirchhoff, confondu avec celui des contraintes de Cauchy dans le cas d'un matériau incompressible.

On a introduit ici des grandeurs critiques τ_c^h et $\delta_t \tau_c^h$, caractéristiques des phénomènes physiques attachés au glissement plastique. Comme l'activité plastique d'un système, ou d'une combinaison de systèmes potentiels au temps t dépend de toute l'histoire de déformation du matériau, il est nécessaire de faire évoluer ces cissions critiques au cours de la déformation. La démarche adoptée est celle décrite par Franciosi [84], et fait appel à des observations microstructurales fines pour déterminer la forme de la matrice d'écrouissage $\mathcal{H}^{*hg}$ que nous étudierons dans la suite, pour les deux cas étudiés, la ferrite et la cémentite.

Loi d'écrouissage du monocristal

20.1 Loi de Schmid-Loi seuil

Pour définir l'écrouissage du monocristal dans la formulation présentée, on part d'un critère du type de la loi de Schmid. Selon les observations expérimentales, un système de glissement facile h devient actif lorsque la cission résolue τ^h atteint un seuil -la cission critique du système h , soit τ_c^h . Pour un monocristal homogène non déformé plastiquement, τ_c^h est initialement identique sur tous les systèmes, et il évolue avec l'histoire des déformations. Il est possible de formaliser les conditions de l'écoulement plastique pour les monocristaux métalliques se déformant par glissement.

Un mécanisme ou système de glissement est activable à l'instant t lorsque la cission résolue τ^h atteint la cission critique $\tau_c^h(t)$. Par convention, on supposera $\delta_t \gamma^h$ positif pour un système h actif.

Un système est alors potentiellement actif à t si

$$\tau^h(t) = \tau_c^h(t)$$

Si h est un système potentiel à l'instant t , il peut être actif s'il reste potentiel à $t + dt$, soit

$$\delta_t^* \tau^h = \delta_t \tau_c^h \quad \text{à} \quad t$$

En résolvant ce système d'équations locales (pour une système supposé actif), on obtient l'expression de l'incrément de glissement du système considéré $\delta_t \gamma^h$ (voir le paragraphe 4.6). L'évolution de la cission critique de chaque système de glissement h constitue la loi d'écrouissage du monocristal.

20.2 Loi physique d'écrouissage

Dans les métaux, le glissement cristallographique résulte des mouvements de défauts linéaires (dislocations) qui réalisent le glissement sur les systèmes actifs et s'accumulent au sein du cristal en un réseau d'obstacles, cause essentielle de l'écrouissage latent (évolution de τ_c^h). Une dislocation peut alors interagir avec un réseau de dislocations présent dans le matériau, et avec le réseau atomique qui oppose une force de type Peierls-Nabarro. Franciosi [84], en étudiant la structure cubique retient quatre types d'interaction qui conduisent à (dans le cas cubique) :

- . l'auto-écrouissage, d'un système de glissement sur lui-même ;
- . l'écrouissage entre systèmes coplanaires, colinéaires ou de paires de systèmes à vecteurs de Burgers perpendiculaires ;
- . l'écrouissage entre paires de systèmes formant des jonctions glissiles,
- . et enfin l'écrouissage entre paires de systèmes formant des jonctions sessiles, nouveaux obstacles au mouvement des dislocations.

Dans le cas isotrope, la loi physique d'écrouissage peut s'écrire sous la forme :

$$\delta_t \tau_c^h = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_c^h} \sum_g a^{gh} \delta_t \rho^h \quad (20.1)$$

où a^{gh} est une matrice d'interaction, fonction de l'énergie de faute d'empilement, et de la densité de dislocations (ρ^h) sur les systèmes impliqués. La loi phénoménologique (anisotrope) que nous utiliserons adopte la forme :

$$\delta_t \tau_c^h = \sum_g \mathcal{H}^{*hg} \delta_t \gamma^g \quad (20.2)$$

où $\mathcal{H}^{*hg}$ est la matrice d'écrouissage physique. Les deux descriptions diffèrent par l'intervalle de sommation. Alors que la forme physique prend en compte tous les 'systèmes' de dislocations [84], la loi adoptée dans la suite (20.2) ne considère que les systèmes de glissement actifs et l'écrouissage latent sur les systèmes inactifs. La corrélation entre l'écrouissage instantané, la distribution des cisssions résolues et la répartition des dislocations n'est pas triviale. Toutefois, sous certaines hypothèses, Franciosi [84] montre que le glissement macroscopique ($\delta_t \gamma^h$), qui dépend de toutes les dislocations créées au cours de la sollicitation, n'est pas nécessairement lié à une multiplication de dislocations obstacles sur le système h , dans la mesure où n systèmes potentiels peuvent voir l'accroissement de leur densité de dislocations sans être nécessairement tous actifs. Franciosi [84] conclue que multiplication d'obstacles et glissement plastique ne sont pas nécessairement liés sur un système h .

Ces propriétés permettent de définir des interactions plus ou moins fortes entre les familles de plans et de directions d'un matériau donné (voir plus loin, deux cas : la ferrite, la cémentite). Dans notre cas, nous nous limiterons à deux types d'interactions, l'une faible (pas de formation de jonction) et l'autre, forte (formation de jonctions glissile ou sessile). L'écrouissage de la perlite étant essentiellement associé aux incompatibilités entre phases, nous ne développerons pas de modèle pour l'écrouissage intracristallin ici. Nous verrons toutefois les effets d'un terme d'annihilation de dislocations [100] sur l'écrouissage du monocristal.

21

Construction des modules tangents du monocristal

Si on choisit la formulation (19.11), il suffit de trouver $\mathcal{G}^{hg}$ tel que :

$$\lambda^h : \mathbf{d} = \sum_g \mathcal{G}^{hg} \delta_t \gamma^g \quad (21.1)$$

et de résoudre le système d'équations $\delta_t^* \tau^h = \delta_t \tau_c^h$ pour obtenir le module tangent du monocristal, défini dans la suite. Dans ce cas, Hill et Rice [80] montrent selon (19.1,19.3,20.2) que

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{hg} &= \mathcal{H}^{*hg} + \lambda^h : \mathbf{p}^g \\ &= \mathcal{H}^{*hg} + \mu^h : \mathcal{L} : \mu^g - \mu^h : (\omega^g \cdot \sigma + \sigma \cdot {}^t \omega^g) \\ &= \mathcal{H}^{*hg} + \mu^h : \mathcal{L} : \mu^g + \mu^h : \alpha^g \end{aligned} \quad (21.2)$$

La matrice des modules d'écrouissage $\mathcal{G}^{hg}$ compte trois termes de signification différente :

- . $(\mathcal{H}^{*hg})$ représente la physique des interactions entre les dislocations du système g sur le système de glissement h , ici limitée à deux types : interaction faible et forte ;
- . $(\mu^h : \mathcal{L} : \mu^g)$ vient du couplage élasticité-plasticité du matériau ;
- . $(\mu^h : \alpha^g)$ représente le terme de convection de la matière, lié à la formulation en transformation finie.

Le tenseur des modules tangents instantanés est défini pour un couple incrément de contraintes $\delta_{Ja} \tau$, incrément de déformation $\mathbf{d}$ associé, à une histoire donnée du matériau. Il contient non seulement l'histoire actuelle du matériau, mais aussi celle développée depuis le début de l'histoire des déformations.

La technique consiste à éliminer $\delta_t \gamma^h$ dans (19.1), en utilisant l'expression (21.1) pour obtenir la loi de comportement. Selon (21.1) :

$$\delta_t \gamma^h = \sum_g \mathcal{G}^{-hg} \lambda^g : \mathbf{d} \quad (21.3)$$

où $\mathcal{G}^{-hg} = (\mathcal{G}^{hg})^{-1}$. Avec la relation (19.5), on montre que :

$$\delta_t \tau = \hat{\mathbf{f}} : \mathbf{d} \quad (21.4)$$

avec

$$\hat{f}_{ijkl} = \mathcal{L}_{ijkl} - \sum_{h,g} \lambda_{ij}^h \mathcal{G}^{-hg} \lambda_{kl}^g \quad (21.5)$$

Le tenseur $\hat{f}_{ijkl}$ possède la symétrie principale de $\mathcal{L}_{ijkl}$ si $\mathcal{G}^{hg}$ est symétrique [91, 80, 86]. En général, les tenseurs $\delta_t \mathbf{n}$ et $\mathbf{g}$ sont associés thermodynamiquement dans la formulation courante du tenseur d'ordre 4 module tangent élastoplastique f selon :

$$\delta_t \mathbf{n} = \mathbf{f} : \mathbf{g} \quad (21.6)$$

On a la relation :

$$\delta_t \mathbf{n} = \delta_{Ja} \tau + \sigma \cdot \mathbf{d} - \mathbf{w} \cdot \sigma \quad (21.7)$$

soit, selon (21.4)

$$\begin{aligned} f_{ijkl} &= \hat{f}_{ijkl} + \frac{1}{2}(\delta_{ml}\delta_{jk} + \delta_{jl}\delta_{mk})\sigma_{im} - \frac{1}{2}(\delta_{il}\delta_{kn} - \delta_{nl}\delta_{ik})\sigma_{nj} \\ &= \mathcal{L}_{ijkl} + \frac{1}{2}(\delta_{ml}\delta_{jk} + \delta_{jl}\delta_{mk})\sigma_{im} - \frac{1}{2}(\delta_{il}\delta_{kn} - \delta_{nl}\delta_{ik})\sigma_{nj} \\ &\quad - \sum_{h,g} \lambda_{ij}^h \mathcal{G}^{-hg} \lambda_{kl}^g \end{aligned} \quad (21.8)$$

Cette expression du module tangent est celle adoptée dans la démarche qui suit. En effet, la condition de symétrie principale est vérifiée si la matrice $\mathcal{G}^{hg}$ est symétrique, ce qui est le cas. La formulation proposée dans cette étude répond aux exigences de stabilité du modèle.

Résultats

22.1 Introduction

Pour représenter l'évolution du monocristal au cours du chargement, il est nécessaire de choisir les mesures de contrainte et de déformation adaptées. Par exemple, on peut utiliser en traction : le deuxième tenseur de Piola-Kirchhoff ou tenseur de Piola-Lagrange, associé au tenseur de déformation de Green-Lagrange -pour comparer la simulation à une courbe rationnelle; ou alors le tenseur de Cauchy ou de Kirchhoff, associé au tenseur de déformation d'Euler-Almansi -pour comparer la simulation à une courbe conventionnelle.

En plus de ces mesures 'globales' du grain monocristallin, on suit l'évolution de l'orientation cristalline par celle des angles d'Euler au cours d'une sollicitation. Plus localement, l'évolution de l'écoulement plastique est caractérisée par celle des forces motrices associées aux mécanismes élémentaires de déformation, soient l'intensité de glissement et la cission critique d'un système de glissement à un instant donné.

Il est possible, dans le contexte du modèle présenté, de réaliser plusieurs types de chargement du monocristal. Nous nous limiterons ici aux cas de la traction uniaxiale, du cisaillement et du laminage imposés par le gradient de vitesses de transformation.

Deux géométries de glissement font l'objet de ce paragraphe, le cas de la structure cubique centrée de la ferrite et celui de la cémentite orthorhombique, qui conditionne de façon importante l'écrouissage de la perlite.

22.2 Données du problème

22.2.1 Géométrie du glissement

Ferrite

Tous les systèmes considérés sont de la même nature. Chaque glissement peut s'effectuer dans l'une ou l'autre direction, indifféremment. Pour plus de clarté, le tableau qui suit indique la correspondance entre les notations utilisées ici pour les systèmes de glissement et celles étendues de Schmid et Boas où :

a : $[\bar{1}11]$; b : $[111]$; c : $[11\bar{1}]$; d : $[1\bar{1}1]$

1 : (011); 2 : (01 $\bar{1}$); 3 : (101); 4 : (10 $\bar{1}$); 5 : (1 $\bar{1}$ 0); 6 : (110)

1/2	5b	13/14	6d
3/4	4b	15/16	4d
5/6	2b	17/18	1d
7/8	6a	19/20	5c
9/10	3a	21/22	3c
11/12	2a	23/24	1c

TAB. 22.1 – Tableau de correspondance des notations adoptées, avec celles étendues de Schmid et Boas (Exemple : 3/44b signifie que le système n°3 est $(10\bar{1})[111]$, et le n°4 prend la direction opposée : $(10\bar{1})[\bar{1}11]$.)

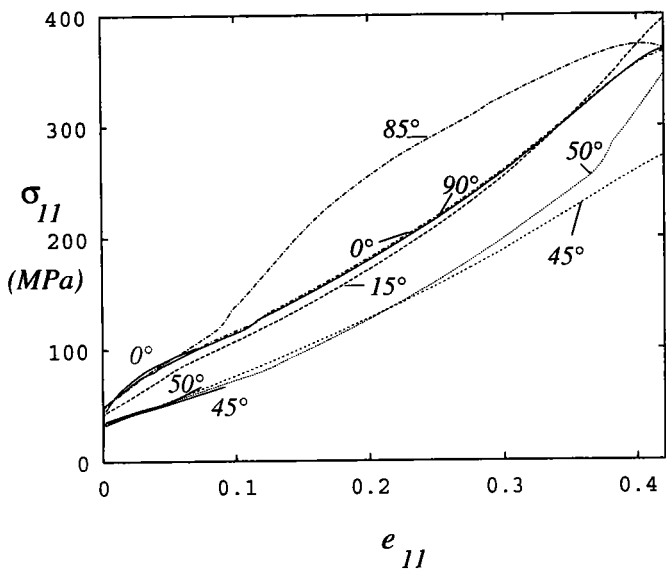


FIG. 22.1 – Simulation de traction d'un monocristal de ferrite. Comparaison avec les mesures expérimentales de Franciosi [84] : l'orientation initiale des monocristaux (issu de la recristallisation après un fort taux de laminage) est de type $\langle 110 \rangle$. Les angles (θ) indiqués sur chaque courbe correspondent à une précession ψ de $45^\circ + \theta$.

Lors de ses essais de glissement multiple en traction sur des monocristaux de ferrite orientés, Franciosi [84] relie la nature du glissement multiple à l'allure des courbes contrainte-déformation. Bien qu'une seule famille de plans de glissement soit prise en compte dans les simulations proposées, le modèle correspond aux résultats expérimentaux de Franciosi [84] en traction (voir figure 22.1), jusqu'à 10% de déformation de traction.

Cémentite

1/2	5'b'	13/14	6'd'
3/4	4'b'	15/16	4'd'
5/6	2'b'	17/18	1'd'
7/8	6'a'	19/20	5'c'
9/10	3'a'	21/22	3'c'
11/12	2'a'	23/24	1'c'

TAB. 22.2 – Tableau de correspondance des notations adoptées, avec celles étendues de Schmid et Boas.

Le cas de la cémentite est délicat. Comme les mécanismes de déformation plastique de cet intermétallique sont encore peu connus, nous chercherons à simplifier au maximum le choix des systèmes de glissement. Compte tenu de la géométrie orthorhombique et des observations expérimentales, les directions de glissement possibles sont :

. les trois directions principales du cristal orthorhombique, de la famille $\langle 100 \rangle$, associées aux plans des familles $\{100\}$ et $\{110\}$;

. et les directions $[abc]$, associées à la famille de plans $\{110\}$.

Nous nous limiterons ici à cette dernière famille de systèmes de glissement. Dans ce cas, les systèmes de glissement possibles de la cémentite sont regroupés dans le tableau 22.2, où :

$$a' : [\bar{1}11] ; b' : [111] ; c' : [11\bar{1}] ; d' : [1\bar{1}1]$$

$$1' : (011) ; 2' : (01\bar{1}) ; 3' : (101) ; 4' : (10\bar{1}) ; 5' : (1\bar{1}0) ; 6' : (110)$$

NB : les notations utilisées pour désigner les plans et les directions sont celles courantes de la cristallographie : dans la structure orthorhombique, la normale au plan de la famille $\{110\}$ est donnée par $\langle \frac{1}{a} \frac{1}{b} 0 \rangle$ par exemple, et la direction de glissement $\langle 111 \rangle$ est donnée par $\langle abc \rangle$.

22.2.2 Matrices des modules d'écrouissage

Dans le cas cubique -celui de la ferrite-, les paires de systèmes coplanaires, colinéaires ou à vecteurs de Burgers perpendiculaires, interagissent faiblement ($- = h1$). Dans le cas de la formation de jonctions (et donc d'obstacles au glissement des dislocations), et pour les autres systèmes, l'interaction sera forte ($+ = h2$). Le coefficient d'anisotropie est fixé par défaut à $A = 1.1$, soit $h2 = Ah1$.

Ferrite

La matrice d'écrouissage (simplifiée) $\mathcal{H}^*$ de la ferrite est donnée (voir tableau 22.3). En général, la valeur de $h1$ est fixée à 160 MPa pour la ferrite.

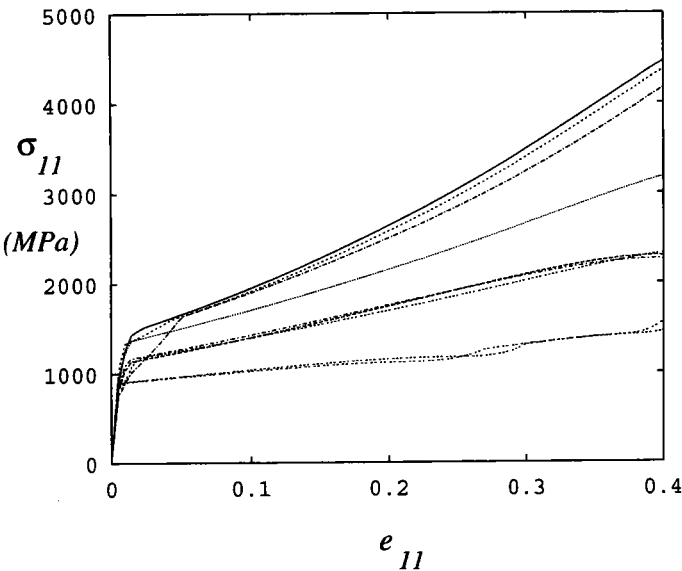


FIG. 22.2 – Simulation de traction d'un monocristal de cémentite, pour diverses orientations du cristal.

Cémentite

Pour la cémentite (voir figure 22.2), il est nécessaire de prendre en compte les critères donnés auparavant et de déduire de la géométrie orthorhombique du cristal une matrice différente dans sa forme à celle de la ferrite. Dans le cas de la cémentite, on peut supposer que l'interaction entre dislocations de la même nature est plus difficile, si on se rappelle la présence de défauts plans et de sous-structures de dislocations dans le monocristal réel. De plus, la présence de liaisons covalentes (donc fortes) entre le fer et le carbone conduit probablement à une rigidité plus grande dans l'écoulement plastique de ce composé : il est donc probable que la valeur de $h1$ soit plus élevée pour le renfort que pour la matrice molle.

22.2.3 Paramètres physiques

Compte-tenu du contexte de la formulation (matériau plastiquement incompressible) et des hypothèses effectuées, le gradient de vitesses $\mathbf{g}$ imposé doit vérifier $Tr(\mathbf{g}) = g_{11} + g_{22} + g_{33} = 0$. Nous nous intéresserons aux cas de la traction, du cisaillement et du laminage. Les données sont les suivantes :

- . les modules de Lamé sont identiques pour les deux constituants, soient : $\lambda = 101GPa$, $\mu = 80GPa$;
- . les systèmes de glissement sont ceux cités ci-dessus, au nombre de 24 ;
- . le seuil critique d'écoulement est :

$$\begin{aligned} \tau_c^{\alpha} &= 20MPa && \text{pour la ferrite } \alpha \\ \tau_c^{\theta} &= 500MPa && \text{pour la cémentite } \theta \end{aligned}$$

- . l'écrouissage est supposé constant (faible), avec :

$$h1^{\alpha} = 160MPa$$

	1 2	3 4	5 6	7 8	9 10	11 12	13 14	15 16	17 18	19 20	21 22	23 24
1 2	--	--	--	++	++	++	++	++	++	--	++	++
3 4		--	--	++	++	++	++	--	++	++	++	++
5 6			--	++	++	--	++	++	++	++	++	++
7 8				--	--	--	--	++	++	++	++	++
9 10					--	--	++	++	++	++	--	++
11 12						--	++	++	++	++	++	++
13 14							--	--	--	++	++	++
15 16								--	--	++	++	++
17 18									--	++	++	--
19 20										--	--	--
21 22											--	--
23 24												--

TAB. 22.3 -

Matrice des modules d'écrouissage de la ferrite, pour une seule famille de systèmes de glissement [84].

$$h1^{\theta} = 500MPa$$

Pour la ferrite, la valeurs utilisées sont celles rencontrées le plus souvent dans la littérature. La correspondance entre les trois courbes obtenues par Franciosi [84] (à 45, 50 et 85°, jusqu'à 10% de déformation) montre que l'anisotropie engendrée par la glissement semble correct.

La cémentite est une phase métastable que l'on ne peut trouver sous la forme d'un monocristal. Les courbes calculées le sont avec les paramètres calculés pour fitter des courbes de traction expérimentales que nous verrons dans la partie suivante (les valeurs prises ici sont inférieures). Toutefois, on peut noter qu'un 'monocristal' de cémentite peut atteindre des contraintes de l'ordre de 4 GPa pour de larges déformations (40%), soit dix fois plus qu'un monocristal de ferrite.

Conclusion

Il semble, d'après ces premiers résultats que la formulation eulérienne convienne à l'estimation du module tangent élastoplastique du monocristal, et cela pour au moins deux structures cristallines de géométries diverses. Comme il a été montré précédemment, la stabilité de l'écoulement est caractérisée par la matrice $\mathcal{G}^{hg}$, fonction de l'évolution de la structure interne du matériau. Si celle-ci est non symétrique, minimiser l'énergie de déformation peut conduire à un écoulement instable : il serait nécessaire de déterminer la dérivée seconde de $\delta_i \mathbf{n} : \mathbf{g}$.

A l'échelle cristalline, d'autres paramètres sont observables, comme la densité de dislocations, l'orientation cristalline. Ici, l'évolution de la structure interne et de l'écrouissage local sont caractérisés respectivement par l'évolution des angles d'Euler (voir annexe B) et l'activité plastique. Cette dernière contient les combinaisons de systèmes de glissement actifs au cours du chargement et l'évolution de la cission critique avec l'histoire des déformations (voir annexe C).

L'anisotropie de comportement des monocristaux qui est caractérisée ici est celle de la géométrie cristalline du glissement dans chaque constituant de la perlite. L'écrouissage intracristallin est supposé constant et faible pour la ferrite, en relation avec les hypothèses du modèle de comportement de la perlite : en effet, le phénomène déterminant étudié dans ce travail est l'écrouissage inter-lamelles.

La ductilité de la cémentite est complexe. Il serait intéressant d'ajouter aux 24 systèmes de glissement pris en compte ici, les autres plans de glissement (notamment les plans de base) de la structure et d'observer les modifications de comportement du monocristal de cémentite. Nous rappelons ici que la cémentite est susceptible de s'écouler plastiquement dans le contexte du tréfilage de la perlite, essentiellement. Il ne peut donc y avoir de correspondance entre simulation et expérience à ce niveau.

Enfin, la prise en compte de l'évolution de la structure cristalline au cours du chargement (transformation finie) permet d'évaluer, dans le contexte de l'îlot perlitique, les contraintes résiduelles, après un essai de traction par exemple. A cette fin, il est nécessaire d'associer le comportement du monocristal aux spécificités de la perlite (interface-obstacle, voir la suite), et de l'intégrer dans un processus d'homogénéisation adapté.

Notations

$\delta_t \mathbf{N}, \mathbf{G}$: incrément de contrainte nominale et gradient de vitesse globaux (mésoscopiques)

$\delta_t \xi$: amplitude du saut de $\mathbf{g}$ à l'interface

$\mathcal{P}, \mathcal{C}, \nu$: opérateur interfacial de Hill, matrice de Christoffel et normale au plan des lamelles

$\mathbf{a}^\varphi, \mathbf{b}^\varphi$: opérateurs de localisation du gradient de vitesse et du taux de contrainte nominale

$\mathbf{f}, \mathcal{S}$: modules tangent élastoplastique et des complaisances

Comportement de l'îlot perlitique

Introduction

Nous avons introduit dans le chapitre précédent deux échelles, celle -discrète- du glissement plastique, et celle -continue- du solide monocristallin sollicité dans le repère matériel. Dans cette approche, nous supposons le grain homogène, au moins jusqu'à des déformations de quelques dizaines de pour-cent. Dans le cas d'un matériau hétérogène en général, et celui du bi-cristal en particulier, le problème se complexifie, puisque aux difficultés précédentes s'ajoutent celles résultant de la structure même du grain biphasé -il s'agit d'un effet de microstructure- structure susceptible de contenir des joints de phase, des désorientations relatives de cristaux voisins, des hétérogénéités et anisotropie élastiques et enfin les effets de la texture de déformation. La présence d'une structure biphasée qui se surajoute à la structure monocristalline et à ses défauts, nécessite, dans le cadre d'une approche mésoscopique, des paramètres cachés supplémentaires tenant compte de la nature biphasée du matériau.

La représentation phénoménologique macroscopique du comportement plastique des métaux ne peut prendre en compte la nature physique des mécanismes élémentaires de déformation plastique à l'échelle des défauts du réseau, du cristal ou de l'agrégat biphasé, et de ce fait, ne peut constituer la seule approche à adopter, même si son caractère pratique attire beaucoup les ingénieurs.

L'approche micromécanique tient compte dans une certaine mesure de la structure monocristalline, mais à cause des effets mécaniques inter-cristaux, l'état de contrainte d'un cristal est très différent de celui réalisé dans un essai de traction, même lorsque le bi-cristal est sollicité mésoscopiquement en traction.

La détermination des propriétés du milieu homogène équivalent se fait donc à partir de la connaissance des propriétés des constituants, du rôle des interfaces et du rôle de la microstructure de l'agrégat. A l'échelle intracristalline (ou intralamellaire ici), ce sont les multiplications des dislocations et l'évolution de leur répartition spatiale qui est déterminante, via une loi d'écrouissage connue (déterminée dans le chapitre précédent). Nous supposons dans la suite que chaque monocristal lamellaire se déforme de façon homogène, ou plus précisément, que les hétérogénéités intracristallines sont faibles devant les hétérogénéités intercristallines. En effet, à cette dernière échelle (celle de l'îlot), apparaissent les incompatibilités du champ de déformation plastique, liées aux désorientations relatives des réseaux cristallins - soit, dans le cas du grain perlitique, les désorientations entre les réseaux de la ferrite et de la cémentite²¹ - et aussi à la nature de l'écrouissage. Encore à cette échelle, les textures de déformation sont une conséquence des rotations des réseaux et des conditions de compatibilité entre monocristaux. Enfin, la morphologie des phases ou forme des cristaux est ici spécifique, puisque les grains de l'îlot sont des lamelles

²¹qui sont connues dans la littérature

monocristallines.

Nous allons voir comment la méthode de transition d'échelles permet une approche générale de ce matériau complexe, et caractérise aussi bien les champs locaux que globaux.

Dans un premier temps, il est très important de noter ici les hypothèses et techniques fondamentales d'une étape d'homogénéisation.

Le principe de séparation d'échelles est de représenter la réalité microhétérogène d'un matériau par une fiction homogène mécaniquement équivalente. Cette méthode n'est utilisable que sous certaines conditions logiques :

- . macrohomogénéité : la taille l du volume élémentaire considéré (ici l'îlot) doit être suffisamment grande pour qu'il soit représentatif ;
- . microhétérogénéité : la taille caractéristique d des hétérogénéités et/ou mécanismes de déformation pris en compte doit être très petite devant l ; . soit :

$$d_o \ll d \ll l \ll L$$

où d_o est la limite de validité de la mécanique des milieux continus (de l'ordre de quelques nm), L la taille caractéristique de l'échantillon du matériau, et le chargement doit être homogène par rapport à ces hétérogénéités.

Ici, dans le cas de l'îlot perlitique, la taille caractéristique d des hétérogénéités est l'espacement entre lamelles λ_p . Si on choisit des îlots suffisamment gros (quelques dizaines de fois l'espacement interlamellaire), ces conditions sont vérifiées. Il faut toutefois faire attention aux corrélations éventuelles entre entités de la structure. Nous avons fait l'hypothèse, dans la première partie de cet ouvrage, que les îlots perlitiques sont décorrélés, rien ne s'oppose donc à considérer l'îlot comme le grain de la perlite (et non un ensemble d'îlot possédant des relations d'orientation connues entre eux).

Le problème de l'homogénéisation se pose en plusieurs étapes. Il est d'abord nécessaire de définir et décrire le volume élémentaire représentatif (V.E.R.) du matériau (ou ici grain) que l'on veut modéliser, puis déterminer le milieu homogène équivalent (M.H.E) tel que :

$$\begin{aligned} \forall \mathbf{X} \in \text{M.H.E.}, \quad \delta_t \mathbf{N}(\mathbf{X}) &= \langle \delta_t \mathbf{n}(\mathbf{x}) \rangle_{V.E.R.\mathbf{x}} \\ \mathbf{G}(\mathbf{X}) &= \langle \mathbf{g}(\mathbf{x}) \rangle_{V.E.R.\mathbf{x}} \end{aligned}$$

La méthodologie de l'homogénéisation compte en général trois étapes.

- . La représentation du V.E.R. : il s'agit de réaliser une description géométrique et mécanique par :
 - **l'Identification des constituants** mécaniques retenus, selon une représentation globale de chaque phase (voir chapitre précédent), en premier lieu, et une prise en compte de la structure bi-cristalline, en dernier lieu, notamment la nature des glissements plastiques et l'orientation cristalline des grains ;
 - **la Structure d'hétérogénéité du matériau** , ou encore sa texture cristallographique initiale, la texture morphologique et les corrélations spatiales entre orientations cristallines, paramètres de forme et de taille de grain.

Cette représentation sous-tend deux hypothèses générales : la première suppose que le comportement mécanique des phases dans le milieu hétérogène est la même que celui des phases isolées, et la seconde donne la possibilité d'une définition multiple du milieu homogène équivalent (la distribution spatiale des phases est incomplète).

. L'étape de localisation, qui consiste à déterminer les champs locaux $\delta_t \mathbf{n}(\mathbf{x})$ et $\mathbf{g}(\mathbf{x})$ en fonction des champs globaux $\delta_t \mathbf{N}$ et $\mathbf{G}$, en :

- **taux de contraintes homogènes au contour** où une distribution de forces de surface $\delta_t T_i^d$ s'exerce sur la frontière du V.E.R. de normale $\mathbf{n}^{ver}$: $\delta_t T_d^i = \delta_t N_{ik} n_k^{ver}$;
- **ou taux de déformations homogènes en contour** où les vitesses de déplacement imposées à la frontière sont : $v_i^d = G_{ik} x_k$.

Il s'agit là de problèmes aux limites classiques. Toutefois, il est nécessaire de faire des hypothèses supplémentaires ou approximations pour estimer les caractéristiques globales du grain biphasé. Par exemple, les modèles de type champ moyen sont très utiles, notamment dans le schéma auto-cohérent. Il est aussi possible de construire une famille de champs de contraintes équilibrées ou de déformations admissibles (compatibles) par des approches variationnelles, et ainsi obtenir un encadrement des caractéristiques globales du grain de perlite. On obtient alors les relations :

$$\begin{aligned}\delta_t \mathbf{n}(\mathbf{x}) &= \mathbf{b}(\mathbf{x}) : \delta_t \mathbf{N} \\ \mathbf{g}(\mathbf{x}) &= \mathbf{a}(\mathbf{x}) : \mathbf{G}\end{aligned}$$

. L'étape d'homogénéisation combine les équations de comportement local $\delta_t \mathbf{n} = \mathbf{f} : \mathbf{g}$, avec une relation de moyenne, $\langle \mathbf{g} \rangle = \mathbf{G}$ par exemple, et les relations de localisation, de sorte à obtenir le comportement du milieu homogène équivalent en :

. taux de déformations homogènes en contour :

$$\mathbf{G} = \langle \mathbf{g}(\delta_t \mathbf{n}) \rangle = \langle \mathbf{g}(\mathbf{B}(\mathbf{x}) : \delta_t \mathbf{N}) \rangle$$

. taux de contraintes homogènes en contour :

$$\delta_t \mathbf{N} = \langle \delta_t \mathbf{n}(\mathbf{g}) \rangle = \langle \delta_t \mathbf{n}(\mathbf{A}(\mathbf{x}) : \mathbf{G}) \rangle$$

Il est nécessaire d'écrire les conditions de compatibilité et d'équilibre en un point de l'interface inter-lamelles monocristallines. Avec ces équations constitutives et une méthode d'homogénéisation adaptée, il est possible d'obtenir le comportement global du grain perlitique. Le principal outil mathématique que nous allons utiliser est l'opérateur interfacial défini selon le formalisme de Hill [87].

Position du problème-Equations constitutives

25.1 Description du V.E.R.

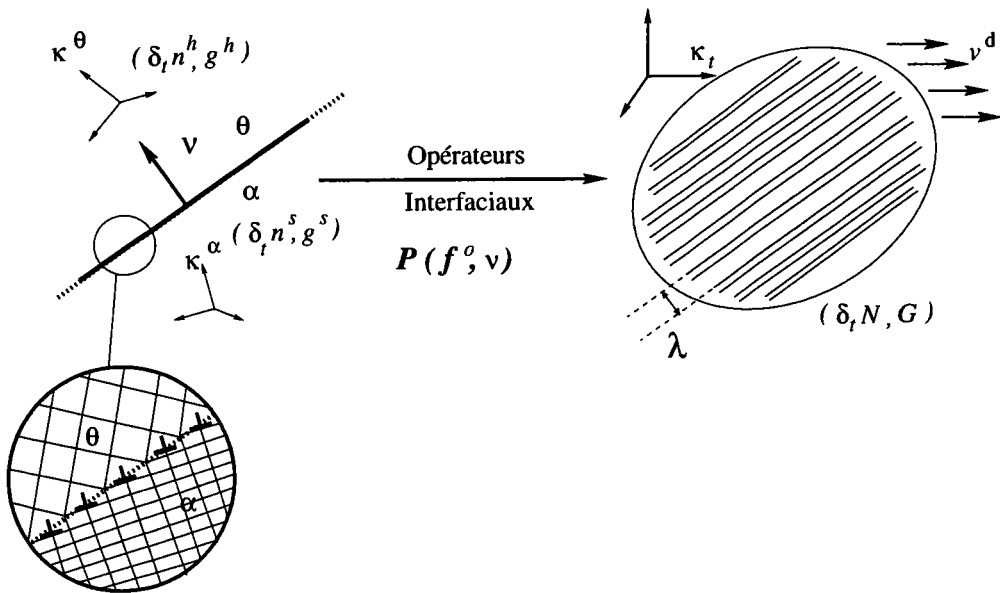


FIG. 25.1 – Représentation schématique du volume élémentaire représentatif choisi pour le grain de perlite. Le principe d'homogénéisation est rappelé.

Le grain de perlite est un composite à renfort lamellaire en faible fraction volumique ζ . Il est constitué d'un grand nombre de lamelles monocristallines alternées. Nous rappelons l'hypothèse selon laquelle les hétérogénéités interphases (ou interlamelles) sont prépondérantes par rapport aux hétérogénéités intra-cristallines. Dans ce cas, une description du volume élémentaire représentatif est donnée dans la figure 25.1. Il est alors caractérisé par :

- la fraction volumique de renfort ζ , ici la cémentite à hauteur de 11.5% ;
- l'orientation de la normale à l'interface matérielle intragranulaire (grain de perlite), notée ν sur la représentation ;

- . l'orientation cristalline de la phase majoritaire par rapport aux axes matériels, soit les angles d'Euler de la ferrite ;
- . les relations d'orientation entre la matrice et le renfort.

Une hypothèse implicite ici est celle du champ moyen, explicitée selon :

$$\begin{aligned}\forall \mathbf{x} \in V^\alpha, \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}) &= \langle \mathbf{g}(\mathbf{x}) \rangle_{V^\alpha} = \mathbf{g}^s \\ \forall \mathbf{x} \in V^\alpha, \quad \delta_t \mathbf{n}(\mathbf{x}) &= \langle \delta_t \mathbf{n}(\mathbf{x}) \rangle_{V^\alpha} = \delta_t \mathbf{n}^s\end{aligned}$$

où V^α désigne le volume de phase molle, et ceci est vrai aussi pour la phase de renfort. Nous pouvons maintenant supprimer la dépendance en position $\mathbf{x}$ des tenseurs.

25.2 Equations constitutives

Dans le cadre de l'approximation quasi-statique et en supposant les forces volumiques extérieures négligeables, l'équation d'équilibre s'écrit en vitesses :

$$\nabla \cdot \delta_t \mathbf{n} = \mathbf{0}$$

A l'interface séparant les deux cristaux, de normale unitaire connue $\boldsymbol{\nu}$ -égale en tout point de l'interface à un moment donné- les champs de taux de contraintes nominales sont en équilibre. Le vecteur taux de contraintes $\delta_t T_i^d = \delta_t n_{ij} \nu_j$ doit être continu, soit :

$$\begin{aligned}[\delta_t \mathbf{n}] \cdot \boldsymbol{\nu} &= \mathbf{0} \\ [\delta_t n_{ij}] \cdot \nu_j &= 0\end{aligned}\tag{25.1}$$

qui constitue l'équation d'équilibre du système biphasé à travers l'interface. La notation $[\mathbf{X}]$ signifie le saut de $\mathbf{X}$ à travers l'interface, soit en notant s l'indice relatif à la phase molle et h celui associé au renfort, $[\mathbf{X}] = \mathbf{X}^s - \mathbf{X}^h$. Si on suppose que le champ de vitesses v_i est continu en tous les points du solide, y compris à l'interface, le gradient de vitesses $g_{ij} = v_{i,j}$ doit satisfaire la condition de compatibilité traduite par :

$$\begin{aligned}[\mathbf{g}] &= \delta_t \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\nu} \\ [g_{ik}] &= \delta_t \xi_i \nu_k\end{aligned}\tag{25.2}$$

où $\delta_t \boldsymbol{\xi}$ est l'amplitude du saut du gradient de vitesses à l'interface. Ces deux systèmes d'équations (25.1, 25.2) sont à associer à la loi de comportement que nous avons déterminée dans le chapitre précédent. Connaissant les équations locales, il est maintenant possible de résoudre le système pour obtenir les relations de localisation. La technique utilisée est celle des opérateurs interfaciaux que nous allons présenter dans le paragraphe suivant.

Opérateurs Interfaciaux

Selon Hill [87], pour étudier les discontinuités des champs de contraintes ou de déformation dans les milieux composites, il est nécessaire de faire appel à une décomposition des tenseurs d'ordre deux en une partie extérieure et une partie intérieure par rapport à l'interface.

26.1 Relations de localisation-Définition du tenseur $\mathcal{P}^o$

Pour résoudre la localisation, c'est à dire trouver les tenseurs de localisation tels que :

$$\begin{aligned} \mathbf{g}^h &= \mathbf{a}^h : \mathbf{G} \\ \mathbf{g}^s &= \mathbf{a}^s : \mathbf{G} \end{aligned} \quad (26.1)$$

ou

$$\begin{aligned} \delta_t \mathbf{n}^s &= \mathbf{b}^s : \delta_t \mathbf{N} \\ \delta_t \mathbf{n}^h &= \mathbf{b}^h : \delta_t \mathbf{N} \end{aligned} \quad (26.2)$$

il est nécessaire de résoudre le système constitué par les équations de champ. Rappelons le système à résoudre :

$$\begin{aligned} [\delta_t n_{ij}] \nu_j &= 0 \\ [g_{lk}] &= \delta_t \xi_l \nu_k \\ \delta_t n_{ij}^\varphi &= f_{ijkl}^\varphi g_{lk}^\varphi \end{aligned} \quad (26.3)$$

où les inconnues sont les champs de gradient de vitesses de chaque constituant. Calculons dans un premier temps $\delta_t \xi$. Si on introduit l'équation (5.8.c) dans (5.8.a), on obtient, en introduisant un milieu de référence homogène isotrope quelconque $\mathbf{f}^o$:

$$\begin{aligned} [f_{ijkl} g_{lk}] \nu_j &= 0 \\ \Rightarrow -(\mathbf{f}^o : [\mathbf{g}])_{ij} \nu_j &= ([\delta \mathbf{f} : \mathbf{g}])_{ij} \nu_j \end{aligned}$$

avec $\delta \mathbf{f}^\varphi = \mathbf{f}^\varphi - \mathbf{f}^o$, soit, d'après l'équation (5.8.b) :

$$\begin{aligned} \delta_t \xi_l &= -C_{li}^{o-1} ([\delta \mathbf{f} : \mathbf{g}])_{ij} \nu_j \\ \text{avec} \quad C_{il}^o &= \nu_k f_{ijkl}^o \nu_j \end{aligned} \quad (26.4)$$

où C^o est la matrice de Christoffel, d'ordre 2. On peut alors introduire l'opérateur interfacial $\mathcal{P}^o$ d'ordre 4, symétrique (donc inversible) de sorte à exprimer le saut du gradient de vitesses à l'interface :

$$[g_{lk}] = -\mathcal{P}_{lkji}^o ([\delta \mathbf{f} : \mathbf{g}])_{ij} \quad (26.5)$$

où

$$\mathcal{P}_{ijkl}^o = \nu_j C_{il}^{o-1} \nu_k$$

Le gradient des vitesses $\mathbf{g}$, solution du problème biphasé, est inconnu.

26.2 Estimations de Hashin-Shtrikman - Extension au problème élastoplastique

Pour 'localiser', il est nécessaire de faire une hypothèse supplémentaire qui est la conséquence du principe du champ moyen. En effet, on peut montrer sous les hypothèses déjà citées que :

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= \langle \mathbf{g}(\mathbf{x}) \rangle_{x \in V^{ver}} \\ &= (1 - \zeta) \mathbf{g}^s + \zeta \mathbf{g}^h \end{aligned} \quad (26.6)$$

où ζ est la fraction volumique de renfort. Cette équation supplémentaire de moyenne permet d'obtenir les relations de localisation,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{g}(\mathbf{x}) \rangle_{x \in V^s} &= \mathbf{g}^s = \mathbf{G} - \zeta \mathcal{P}^o : (\delta \mathbf{f}^s : \mathbf{g}^s - \delta \mathbf{f}^h : \mathbf{g}^h) \\ \langle \mathbf{g}(\mathbf{x}) \rangle_{x \in V^h} &= \mathbf{g}^h = \mathbf{G} - (1 - \zeta) \mathcal{P}^o : (\delta \mathbf{f}^h : \mathbf{g}^h - \delta \mathbf{f}^s : \mathbf{g}^s) \end{aligned} \quad (26.7)$$

Une estimation des tenseurs de localisation a^φ est donnée par les tenseurs étendus au cas élastoplastique de Hashin et Shtrikman. Reprenons la première expression du système (26.7)

$$\mathbf{g}^s = \mathbf{G} - \zeta \mathcal{P}^o : ((\mathbf{f}^s - \mathbf{f}^o) : \mathbf{g}^s - (\mathbf{f}^h - \mathbf{f}^o) : \mathbf{g}^h)$$

à laquelle on applique l'opérateur $\mathcal{P}^{o-1}$. Si on associe cette équation avec la relation de moyenne (26.6), on obtient le système :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^{o-1} : \mathbf{G} &= (\mathcal{P}^{o-1} + \zeta(\mathbf{f}^s - \mathbf{f}^o)) : \mathbf{g}^s - \zeta(\mathbf{f}^h - \mathbf{f}^o) : \mathbf{g}^h \\ \mathbf{G} &= (1 - \zeta) \mathbf{g}^s + \zeta \mathbf{g}^h \end{aligned} \quad (26.8)$$

Soit $\mathbf{g}^o$ une variable intermédiaire, de sorte à écrire le système (26.8) de façon plus symétrique :

$$(\mathbf{f}^* + \mathbf{f}^s) : \mathbf{g}^s = (\mathbf{f}^* + \mathbf{f}^h) : \mathbf{g}^h = \mathcal{P}^{o^{-1}} : \mathbf{g}^o \quad (26.9)$$

avec

$$\mathbf{f}^* = \mathcal{P}^{o^{-1}} - \mathbf{f}^o$$

Soit :

$$\begin{aligned} \mathbf{g}^\varphi &= (\mathbf{f}^* + \mathbf{f}^\varphi)^{-1} : (\mathbf{f}^* + \mathbf{f}^o) : \mathbf{g}^o \\ \text{et} \quad \mathbf{g}^o &= (\mathbf{f}^* + \mathbf{f}^o)^{-1} : < (\mathbf{f}^* + \mathbf{f}^\varphi)^{-1} >^{-1} : \mathbf{G} \end{aligned} \quad (26.10)$$

Les tenseurs de localisation sont alors donnés par les estimations étendues au cas élastoplastique de Hashin et Shtrikman, soient :

$$< \mathbf{a}(\mathbf{x}) >_{V^\varphi} = \mathbf{a}^\varphi \approx \mathbf{a}_{HS}^\varphi = (\mathbf{f}^* + \mathbf{f}^\varphi)^{-1} : < (\mathbf{f}^* + \mathbf{f}^\varphi)^{-1} >^{-1} \quad (26.11)$$

Le tenseur $\mathbf{a}^\varphi$ dépend alors de $\mathbf{f}^o$ et de la microstructure via $\mathbf{f}^*$.

Une méthode équivalente consiste à réécrire l'équation (26.5), en choisissant un milieu intermédiaire $\mathbf{g}^o$ tel que :

$$(\mathcal{I} + \mathcal{P}^o : \delta \mathbf{f}^s) : \mathbf{g}^s = (\mathcal{I} + \mathcal{P}^o : \delta \mathbf{f}^h) : \mathbf{g}^h = \mathbf{g}^o \quad (26.12)$$

et on montre aisément que le tenseur de localisation $\mathbf{a}^\varphi$ peut prendre la forme :

$$\mathbf{a}^\varphi = (\mathcal{I} + \mathcal{P}^o : \delta \mathbf{f}^\varphi)^{-1} : < (\mathcal{I} + \mathcal{P}^o : \delta \mathbf{f})^{-1} >^{-1} \quad (26.13)$$

Pour raisonner en taux de contraintes nominales, il suffit de travailler avec le tenseur des complaisances $\mathcal{S}^*$, et l'on obtient de façon similaire :

$$< \mathbf{b}(\mathbf{x}) >_{V^\varphi} = \mathbf{b}^\varphi \approx \mathbf{b}_{HS}^\varphi = (\mathcal{S}^* + \mathcal{S}^\varphi)^{-1} : < (\mathcal{S}^* + \mathcal{S}^\varphi)^{-1} >^{-1} \quad (26.14)$$

Comportement du milieu homogène équivalent

La démarche suivante propose une estimation du module réel $\tilde{\mathbf{f}}$ macroscopique de l'îlot. Comme les tenseurs de Hashin et Shtrikman, l'estimation étendue au cas non linéaire du module tangent équivalent dépend de la microstructure et du milieu de référence $\mathbf{f}^o$.

27.1 Opération de moyenne

Pour obtenir le module de l'îlot, il est nécessaire de faire une autre hypothèse de moyenne, sur le taux des contraintes nominales, soit :

$$\delta_t \mathbf{N} = (1 - \zeta) \delta_t \mathbf{n}^s + \zeta \delta_t \mathbf{n}^h \quad (27.1)$$

27.2 Module tangent équivalent - Extension de la borne de Hashin - Shtrikman

En utilisant les lois de comportement locale et globale, ainsi que les relations de localisation, on obtient :

$$\mathbf{f}^{HS} = \langle \mathbf{f}^\varphi : \mathbf{a}_{HS}^\varphi \rangle \quad (27.2)$$

Une autre expression de $\mathbf{f}^{HS}$ est obtenue par :

$$\begin{aligned} \delta_t \mathbf{N} &= (1 - \zeta) \mathbf{f}^s : \mathbf{g}^s + \zeta \mathbf{f}^h : \mathbf{g}^h \\ &= (1 - \zeta) (\mathcal{P}^{o-1} : \mathbf{g}^o - \mathbf{f}^* : \mathbf{G}) \end{aligned}$$

soit :

$$\mathbf{f}^{HS} = \langle (\mathbf{f}^* + \mathbf{f}^\varphi)^{-1} \rangle^{-1} - \mathbf{f}^* \quad (27.3)$$

Le tenseur des modules de Hashin et Shtrikman étendus au cas élastoplastique dépend du milieu de référence et de la microstructure via $\mathbf{f}^*$. On vérifie aisément sa symétrie et sa positivité. En effet :

$$\begin{aligned}
 \forall \varphi, \mathbf{f}^* + \mathbf{f}^\varphi &\geq \mathbf{f}^* > 0 \\
 \Rightarrow \forall \varphi, \mathbf{f}^{*-1} &\geq (\mathbf{f}^* + \mathbf{f}^\varphi)^{-1} > 0 \\
 \Rightarrow \mathbf{f}^{*-1} &\geq \sum_{\varphi} \zeta_{\varphi} (\mathbf{f}^* + \mathbf{f}^\varphi)^{-1} > 0 \\
 \Rightarrow \langle (\mathbf{f}^* + \mathbf{f}^\varphi)^{-1} \rangle^{-1} &> \mathbf{f}^* > 0
 \end{aligned} \tag{27.4}$$

où les inégalités sont à associer aux formes quadratiques $\frac{1}{2} \mathbf{g} : \mathbf{f} : \mathbf{g}$, qui représente l'énergie du système considéré.

Si le taux de contraintes nominales macroscopique est imposé, alors le tenseur des complaisances macroscopique est estimé par :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{S}^{HS} &= \mathbf{f}^{HS^{-1}} \\
 &= \langle \mathcal{S}^\varphi : (\mathcal{S}^* + \mathcal{S}^\varphi)^{-1} : (\mathcal{S}^* + \mathcal{S}^\varphi)^{-1} \rangle^{-1} \\
 &= \langle (\mathcal{S}^* + \mathcal{S}^\varphi)^{-1} \rangle^{-1} - \mathcal{S}^*
 \end{aligned} \tag{27.5}$$

Ici encore, le module dépend du milieu de référence $\mathbf{f}^o$.

27.3 Choix du milieu de référence

Le choix du milieu de référence dépend du type de résultat souhaité²², de la précision souhaitée, du type de calcul et de la nature de la microstructure. On suppose que le gradient de vitesses $\mathbf{g}$ est homogène par phases, ce qui est une conséquence de l'hypothèse selon laquelle les hétérogénéités déterminantes sont les hétérogénéités interphases.

Intéressons-nous à quelques propriétés du tenseur étendu au cas élastoplastique de Hashin et Shtrikman $\mathbf{f}^{HS}$. Pour les milieux biphasés en distribution isotrope²³, $\mathbf{f}^{HS}$ est une fonction croissante du milieu de référence $\mathbf{f}^o$:

$$\forall \mathbf{f}_1^o \geq \mathbf{f}_2^o, \quad \mathbf{f}^{HS}(\mathbf{f}_1^o) \geq \mathbf{f}^{HS}(\mathbf{f}_2^o) \tag{27.6}$$

Cette relation n'est pas assujettie à l'isotropie des constituants. On montre aussi :

$$\begin{aligned}
 \text{si } \mathbf{f}^o << \mathbf{f}^\varphi, \mathbf{f}^{HS} &= \mathbf{f}^{Reuss} \\
 \text{si } \mathbf{f}^o >> \mathbf{f}^\varphi, \mathbf{f}^{HS} &= \mathbf{f}^{Voigt}
 \end{aligned} \tag{27.7}$$

²² Cherche-t'on une borne ou une estimation pour les modules effectifs? S'intéresse-t'on aux déformations moyennes par phases?

²³ L'isotropie de la distribution sous-entend une répartition homogène du renfort, sans effet de cluster ou de percolation

où $\mathbf{f}^{Reuss}$ est l'estimation de Reuss du module tangent équivalent, soit

$$\mathcal{S}^{Reuss} = (1 - \zeta)\mathcal{S}^s + \zeta\mathcal{S}^h$$

et

$$\mathbf{f}^{Voigt} = (1 - \zeta)\mathbf{f}^s + \zeta\mathbf{f}^h$$

Ce qui nous permet de conclure aisément :

$$\forall \mathbf{f}^o, \mathbf{f}^{Reuss} \leq \mathbf{f}^{HS} \leq \mathbf{f}^{Voigt} \quad (27.8)$$

Dans le cas présenté, le milieu de référence définit le type de borne étendue de Hashin-Strikman obtenue ; comme $\mathbf{f}^o \gg \mathbf{f}^h$ ou $\mathbf{f}^o \gg \mathbf{f}^s$, dès que les deux phases atteignent le domaine élasto-plastique, l'extension de l'estimation de Hashin-Strikman utilisée ici dans le cadre du comportement non-linéaire des matériaux correspond à la borne inférieure [77] (modules $\mathbf{f}^o$ plus raides que celui des phases constitutives), ou plus précisément à la technique d'homogénéisation de Mori-Tanaka [98], si on considère les lamelles comme des inclusions dont deux dimensions sont infinies. La pertinence de cette borne est évaluée en annexe D.

27.4 Mouvement de l'interface

L'interface est matérielle, attachée aux réseaux des deux constituants de la perlite. Son évolution mésoscopique est alors conditionnée par le gradient de vitesses mésoscopique, soit $\mathbf{G}$. On définit l'évolution de l'interface par les modifications de sa normale notée $\boldsymbol{\nu}$. L'évolution de la normale (géométrique) à l'interface est alors donnée par :

$$\delta_t \boldsymbol{\nu} = -\mathbf{G} \cdot \boldsymbol{\nu} \quad (27.9)$$

Il est important de noter ici que l'interface a les propriétés de l'interface apparente dans la microstructure perlitique, c'est à dire que toute déviation du plan d'habitat réel (atomique) est possible par la présence de marches d'accommodation du désaccord de maille (voir chapitre 1).

A l'échelle des monocristaux, la rotation des réseaux est conditionnée par l'accommodation élasto-plastique locale de la déformation globale.

A l'échelle de l'ilot, l'interface entre constituants va suivre une évolution mésoscopique, fonction du chargement global. La nature de l'interface est ici matérielle et donc attachée aux réseaux cristallins de part et d'autre. De la sorte, on prend en compte les effets de l'anisotropie cristalline (de chaque phase) et de l'anisotropie mésoscopique (générée par la texture morphologique) par rapport à la sollicitation.

L'îlot perlitique : simulations

Les données du problème sont les suivantes :

- le chargement mésoscopique, soit le gradient des vitesses $\mathbf{G}$ (on n'impose pas de gradient des contraintes nominales) ;
- les modules de Lamé, identiques pour les deux phases (élasticité isotrope) :
 $\lambda=101$ GPa et $\mu=80$ GPa ;
- la fraction volumique de renfort, fixée à 11.5% ;
- les relations d'orientation entre constituants de la perlite (voir chapitre 1) ;
- l'orientation de la matrice ferritique dans l'îlot par rapport au repère global, selon les angles d'Euler (ou texture cristallographique) ;
- l'orientation de la normale à l'interface entre constituants, par rapport au repère global (deux angles) (ou texture morphologique) ;
- l'espacement interlamellaire ;
- le coefficient k^φ décrivant la résistance des obstacles à la germination et la multiplication des dislocations dans une lamelle :
 $k^\alpha = k^\theta = 2 \text{ MPa}\mu m$;
- la cission critique initiale (isotrope) sur tous les systèmes :
 $\tau_c^{\alpha\alpha} = 150 \text{ MPa}$, $\tau_c^{\theta\theta} = 1000 \text{ MPa}$;
- la valeur (faible) de la matrice d'écrouissage $\mathcal{H}^{*hg}$, soient
 $h1^\alpha = h1^\theta = 150 \text{ MPa}$, avec un facteur d'anisotropie $A=1.1$;
- la géométrie du glissement dans chaque constituant, donnée dans le chapitre précédent.

Les simulations présentées portent sur un îlot.

28.1 Cisaillement

Le comportement de l'îlot en cisaillement est représenté sur les figures 28.1, 28.2 et selon deux configurations géométriques du plan des lamelles différentes (courbe intermédiaire). L'évolution de la cission dans les phases constitutives de l'îlot sont représentées aussi. L'orientation initiale du plan des lamelles est exactement celle du plan d'habitat atomique, et est perpendiculaire au plan de cisaillement pour la figure 28.1, et parallèle dans le cas de la figure 28.2. Dans le cas de la figure 28.1, la déformation est répartie de façon relativement homogène dans les deux phases et la déformation de la cémentite dans la perlite est très importante. Pour la configuration de

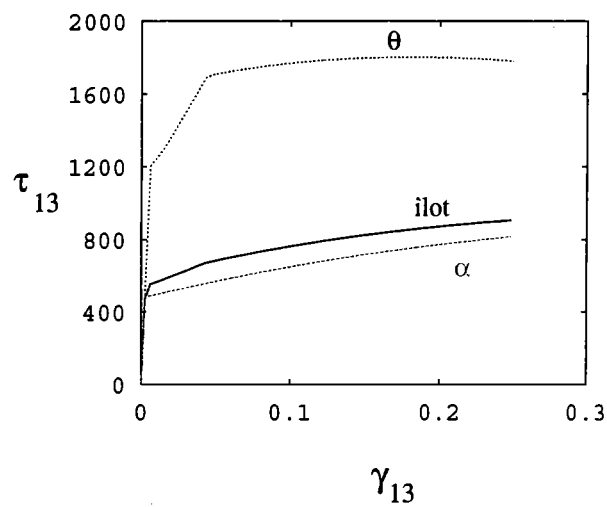


FIG. 28.1 – Evolution de la cission (rationnelle) en fonction du cisaillement (rationnel), pour un îlot dont le plan des lamelles est perpendiculaire au plan de cisaillement. La relation d'orientation entre la ferrite et la cémentite est la n°3 [39], proche de celle de Pitsch-Petch (partie 1).

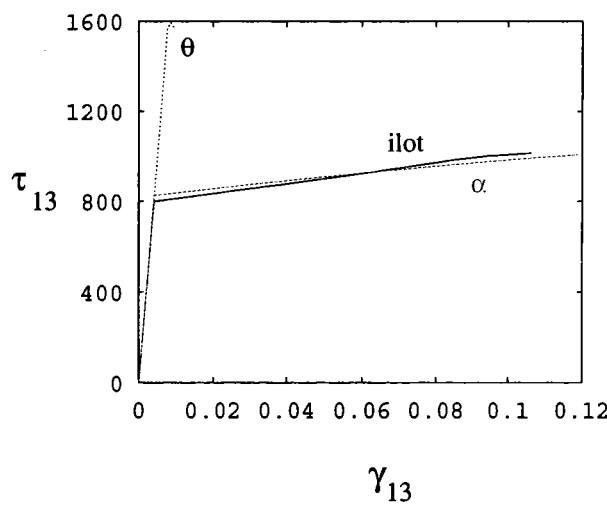


FIG. 28.2 – Evolution de la cission (rationnelle) en fonction du cisaillement (rationnel), pour un îlot dont le plan des lamelles est parallèle au plan de cisaillement. La relation d'orientation entre la ferrite et la cémentite est la n°3 [39], proche de celle de Pitsch-Petch (partie 1).

la figure 28.2, où le plan des lamelles est confondu avec le plan de cisaillement, l'hétérogénéité de déformation entre les constituants est très forte. On observe trois étapes sur la courbe représentative du comportement local de la cémentite (voir figure 28.1) : la première (jusqu'à 1200 MPa) correspond à la réponse élastique de la lamelle de renfort ; la deuxième (linéaire jusqu'à environ 1700 MPa) est associée à l'activation d'un premier ensemble de systèmes de glissement 'faciles' dans la cémentite ; enfin la troisième partie de la courbe correspond à l'accommodation élastoplastique de la cémentite (et de la ferrite).

Enfin, la figure 28.3 montre l'évolution de la cission dans l'îlot et les phases pour une confi-

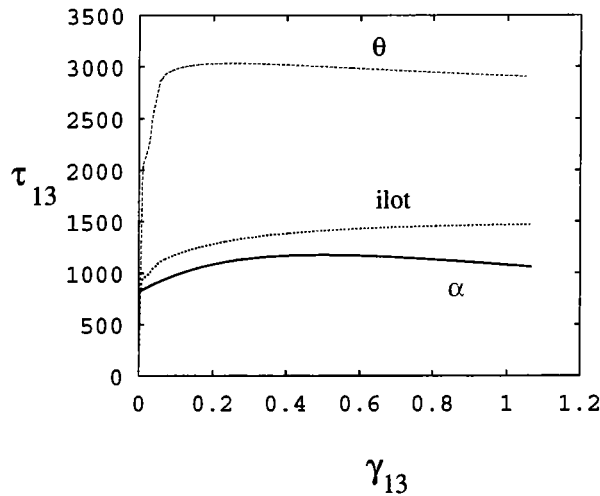


FIG. 28.3 – Evolution de la cission (rationnelle) en fonction du cisaillement (rationnel), pour un îlot dont le plan des lamelles est perpendiculaire au plan de cisaillement. La relation d'orientation entre la ferrite et la cémentite est la n°2 [39], proche de celle de Pitsch-Petch (partie 1).

guration géométrique similaire de l'îlot à celle de la figure 28.1, avec une relation d'orientation entre les phases différente (n°2) et une cission critique initiale dans la ferrite deux fois supérieure. Cette configuration est apparemment plus favorable que la précédente, dans le sens que l'îlot peut se déformer jusqu'à 100% de cisaillement.

Ce résultat est en accord avec la remarque de Belassel [76] qui note que plus la structure lamellaire est fine, plus la déformation est homogène et l'îlot résistant.

28.2 Traction

On peut noter que dans la configuration de la figure 28.4 (plan des lamelles parallèle à l'axe de traction), les deux phases se déforment de façon relativement homogène. Si le plan des lamelles est désorienté d'environ 15° par rapport à l'axe de traction, la répartition des déformations est différente et le comportement de l'îlot se rapproche de celui de la ferrite (figure 28.5). Les résultats obtenus dans ce paragraphe sont fortement dépendant du choix de la géométrie de glissement dans les phases constitutives de la perlite. Il est probable qu'en augmentant les symétries du glissement plastique, l'écoulement plastique dans les phases et l'hétérogénéité de déformation entre la ferrite et la cémentite seraient différents.

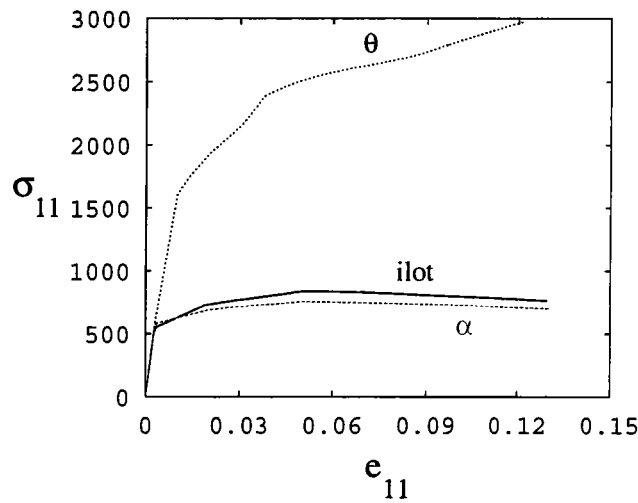


FIG. 28.4 – Evolution de la contrainte (rationnelle) dans la direction de traction en fonction de la déformation (rationnelle), pour un îlot dont le plan des lamelles est parallèle à la direction de traction. La relation d'orientation entre la ferrite et la cémentite est la n°3 [39], proche de celle de Pitsch-Petch (partie 1).

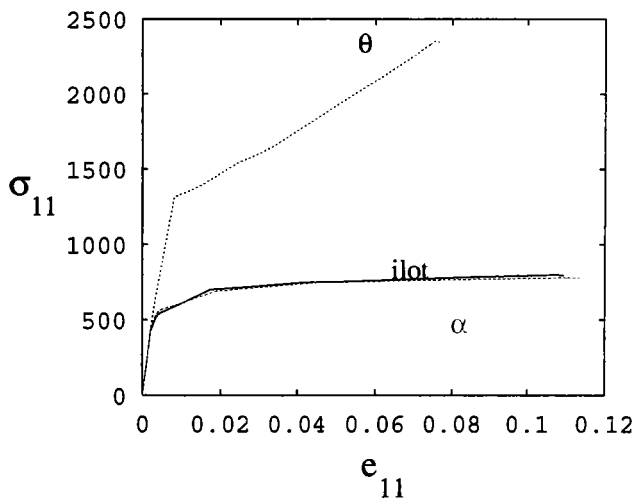


FIG. 28.5 – Evolution de la contrainte (rationnelle) dans la direction de traction en fonction de la déformation (rationnelle), pour un îlot dont le plan des lamelles est à 15° à la direction de traction. La relation d'orientation entre la ferrite et la cémentite est la n°3 [39], proche de celle de Pitsch-Petch (partie 1).

28.3 Conculsion

Le choix de la formulation en transformations finies du comportement du monocristal et de la technique d'homogénéisation présentée permet de prendre en compte les phénomènes tels que la rotation des réseaux cristallins, fondamentale dans une approche complète du comportement des matériaux cristallins tels que les métaux. Nous avons vu ici que l'utilisation des opérateurs interfaciaux permet une bonne description du comportement de l'îlot et par méthode inverse, nous pouvons déduire le comportement de la cémentite, couplé à celui de la ferrite. Nous allons voir maintenant les effets liés à l'orientation des lamelles par rapport à la sollicitation et ses conséquences sur les hétérogénéités de déformation dans la perlite.

Application au cas de l'acier perlitique

Les données du problème sont les suivantes :

- le chargement macroscopique, soit le gradient des vitesses $\mathbf{G}$ (on n'impose pas de gradient des contraintes nominales) ;
- les modules de Lamé, identiques pour les deux phases (élasticité isotrope) :
 $\lambda=101$ GPa et $\mu=80$ GPa ;
- la fraction volumique de renfort, fixée à 11.5% ;
- les relations d'orientation entre constituants de la perlite, soit la relation d'orientation $n^\circ 2$ selon Zhang et Kelly [39] ;
- l'orientation de la matrice ferritique dans l'îlot par rapport au repère global, selon les angles d'Euler (ou texture cristallographique) ;
- l'orientation de la normale à l'interface entre constituants, par rapport au repère global (deux angles) (ou texture morphologique) ;
- l'espacement interlamellaire, fixé à 150 nm ;
- le coefficient k^φ décrivant la résistance des obstacles à la germination et la multiplication des dislocations dans une lamelle :
 $k^\alpha=7.5$ MPa μm , $k^\theta=15$ MPa μm ;
- la cission critique initiale (isotrope) sur tous les systèmes :
 $\tau_c^{\alpha\alpha}=160$ MPa, $\tau_c^{\theta\theta}=1050$ MPa ;
- la valeur (faible) de la matrice d'écrouissage $\mathcal{H}^{*hg}$, soient
 $h1^\alpha = h1^\theta=150$ MPa, avec un facteur d'anisotropie $A=1.1$;
- la géométrie du glissement dans chaque constituant, donnée dans le chapitre précédent.

Il est possible, dans un premier temps, d'approcher le comportement de la perlite par une moyenne de type Taylor-Lin sur cents îlots.

29.1 Comportement global

La courbe macroscopique couple les effets d'hétérogénéité de déformation des phases et l'anisotropie liée à la morphologie lamellaire des grains.

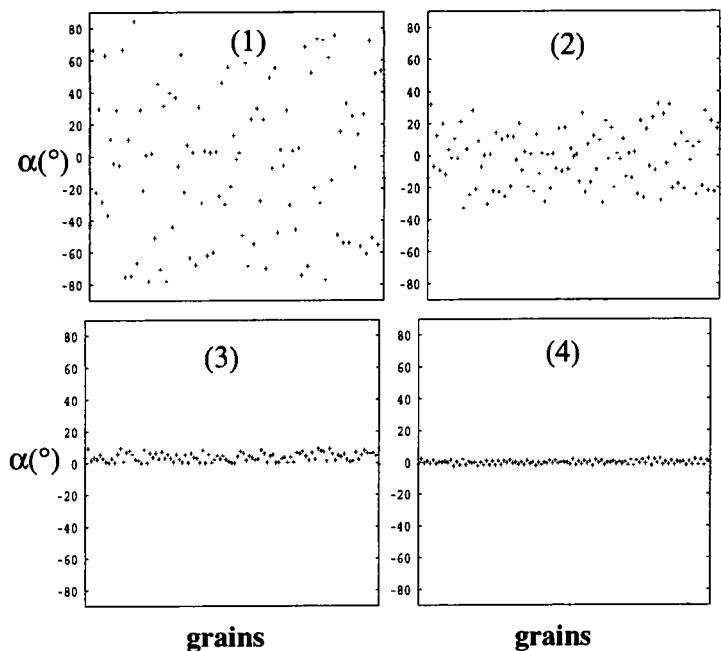


FIG. 29.1 – Répartition de la variation de la distribution des orientations des lamelles par rapport à l'axe de traction pour les 100 îlots (texture morphologique). Quatre cas sont présentés, avec des lamelles de plus en plus alignées avec l'axe de traction.

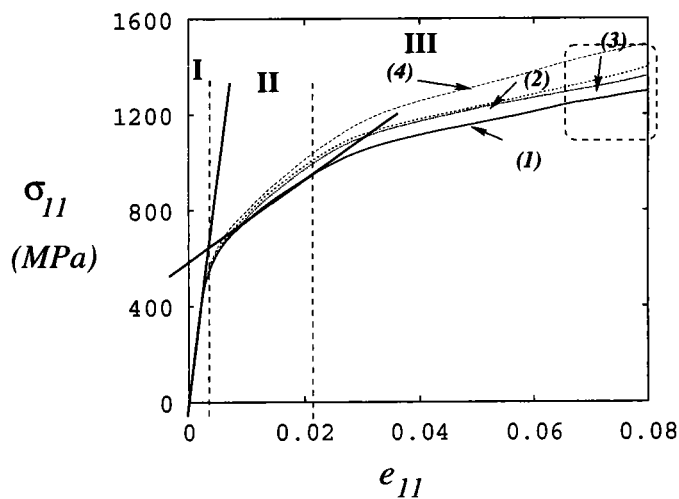


FIG. 29.2 – Evolution de la contrainte macroscopique (rationnelle) dans la direction de traction en fonction de la déformation macroscopique (rationnelle) dans la direction de traction, pour cents îlots dont l'orientation des lamelles par rapport à l'axe de traction est connue.

29.1.1 Traction

Le comportement global obtenu permet de caractériser, par exemple, la courbe de traction de la perlite en trois domaines (voir figure 29.2). Le premier domaine ($e < 1\%$) correspond à l'élasticité des deux phases, supposée ici identique et isotrope pour les deux constituants. Le deuxième domaine (de $e = 1\%$ à $e < 3\%$) semble présenter un comportement à peu près linéaire et correspond au domaine de déformation pour lequel la ferrite est entrée en plasticité. Le troisième domaine ($e > 3\%$) correspond à la plasticité couplée des deux phases, matrice et renfort.

La limite d'élasticité n'est pas nette, étant donnée le flou de la transition sur la courbe macroscopique. La même observation peut être faite sur des courbes de traction expérimentales. On peut expliquer ce comportement à partir des considérations locales d'activité des systèmes de glissement : en effet, l'hétérogénéité de la distribution des cisssions critiques sur les systèmes de glissement des deux phases est liée à l'orientation des plans de glissement par rapport au plan des lamelles ; l'activation des systèmes de glissement est alors progressive et fonction de l'environnement local des contraintes (différent de la ferrite à la cémentite). C'est l'effet sur le libre parcours moyen des dislocations de la morphologie perlitique qui mène à une telle conclusion.

Vers $e = 8\%$, la courbe présente un phénomène de durcissement lié aux limites du modèle : l'écrouissage intralamellaire est ici supposé constant et faible, en relation avec l'accommodation déterminante des incompatibilités de déformation à l'interface ; la moyenne de Taylor-Lin ne prend pas en compte le caractère composite à l'échelle mésoscopique (celle des îlots), c'est à dire qu'un îlot dont la configuration morphologique correspond à un grain de perlite 'dur' (soit, avec des lamelles perpendiculaires à l'axe de traction) sera sollicité de la même façon qu'un îlot 'mou' ; enfin, après plus de 8% de déformation de traction sur une perlite non tréfilée, il est raisonnable de supposer l'apparition de micro-fissures instables, qui contribuent probablement de façon non négligeable à l'adoucissement du matériau en fin de trajet de traction, avant la striction.

Du fait du couplage des effets de la cristallographie des phases et de la morphologie des grains, mais aussi du type de chargement, l'effet de l'orientation des lamelles, caractérisé sur les figures 5.8 et 5.9, peut être analysé. Notons toutefois que la configuration morphologique la plus dure correspond à une distribution des orientations des lamelles dans un cône de 40° par rapport à l'axe de sollicitation.

29.1.2 Cisaillement

Dans le cas du cisaillement, les orientations des plans des lamelles, parallèles pour la configuration 4 au plan de cisaillement, contribuent fortement à la modification de l'écrouissage de la perlite. On observe effectivement, sur la figure 29.3 que la configuration alignée ($n^\circ 4$) correspond à un écrouissage très faible de la perlite -la contribution au cisaillement étant essentiellement celle de la ferrite-, alors que dans la configuration initiale ($n^\circ 1$) des orientations des plans des lamelles, la contribution à l'écrouissage de la cémentite est nette et durcit fortement le matériau. Pour mieux comprendre les phénomènes décrits ci-dessus, à l'échelle macroscopique, nous allons caractériser, dans le paragraphe suivant, le comportement des constituants à l'échelle microscopique. Les contraintes utilisées jusqu'ici sont d'ordre I. Si on associe à la morphologie de l'îlot (e.i. et orientation) un caractère plus ou moins ductile du grain biphasé de la perlite, on peut considérer que les effets mesurés ci-dessus correspondent à un ordre de contraintes inférieur, correspondant à la fiction d'un grain biphasé méso-homogène. Ainsi, les modifications de comportement mesurées dans ce paragraphe sont à associer aux contraintes d'ordre II représentative

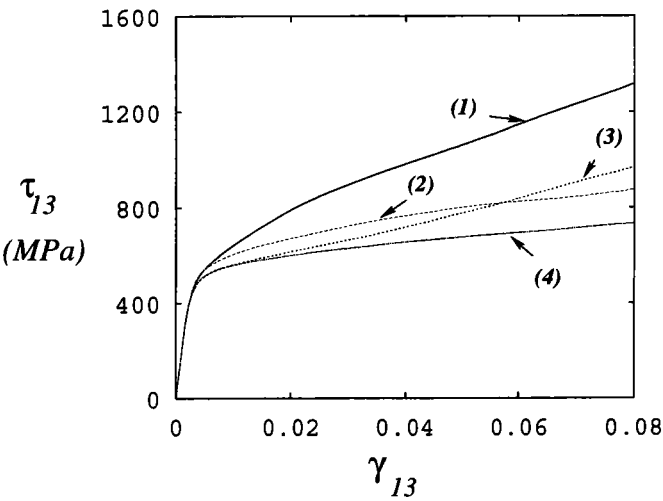


FIG. 29.3 – Evolution de la cission macroscopique (rationnelle) en fonction du cisaillement macroscopique (rationnel), pour cent îlots dont l'orientation des lamelles par rapport à la direction de cisaillement est connue.

de l'hétérogénéité entre îlots, soit σ_i^{II} .

29.2 Comportement local

Nous avons introduit, dans le chapitre 6, les contraintes d'ordre I pseudo- macroscopiques. L'une, σ_α^I représente la valeur moyenne (ici, sur 100 îlots) des contraintes dans la ferrite de la perlite, l'autre, σ_θ^I , dans la cémentite respectivement.

29.2.1 Traction

Dans le cas de la traction, les modifications de l'orientation des lamelles génère un durcissement macroscopique essentiellement en rapport avec l'écrouissage de la cémentite. Comme le chargement du renfort dépend de la réponse de la matrice ferritique à la sollicitation globale (et vice-versa), l'écrouissage de la cémentite dépend de la capacité de la ferrite à accommoder la déformation globale.

Dans le cas de la traction, les lamelles de ferrite et de cémentite sont fortement sollicitées. La contrainte dans la ferrite (voir figure 29.4) évolue selon trois étapes. La première étape (domaine I^α) correspond à l'élasticité de la phase cubique. La seconde (domaine II^α) est à associer à l'accommodation élastoplastique que la ferrite opère au cours du chargement global. Lorsque la cémentite entre en plasticité, elle participe à l'accommodation de la déformation et écroute la ferrite (domaine III^α). De même, le fort écrouissage observé sur la cémentite au cours de la traction (voir figure 29.5 , en comparaison aux courbes du monocristal, voir chapitre 22) est à associer à l'accommodation élasto-plastique dans la ferrite. La cémentite dans la perlite lamellaire plastifie en traction à partir de 3% de déformation macroscopique.

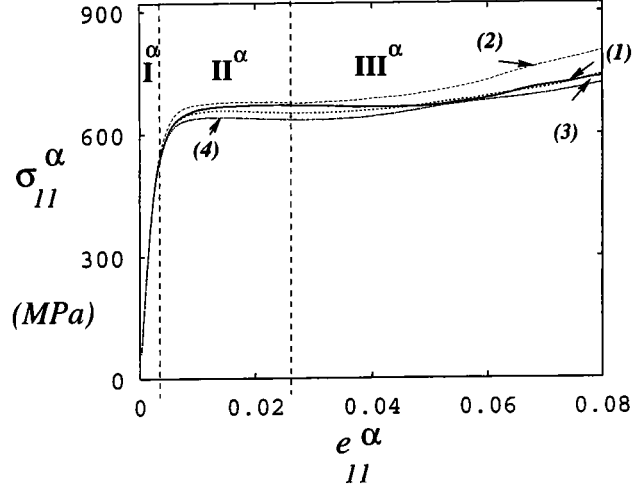


FIG. 29.4 – Evolution de la moyenne de contraintes avec la déformation moyenne dans la ferrite perlitique. Les simulations de traction sont effectuées pour 100 îlots, selon un modèle de Taylor-Lin, dont les lamelles sont orientés selon la figure 29.1.

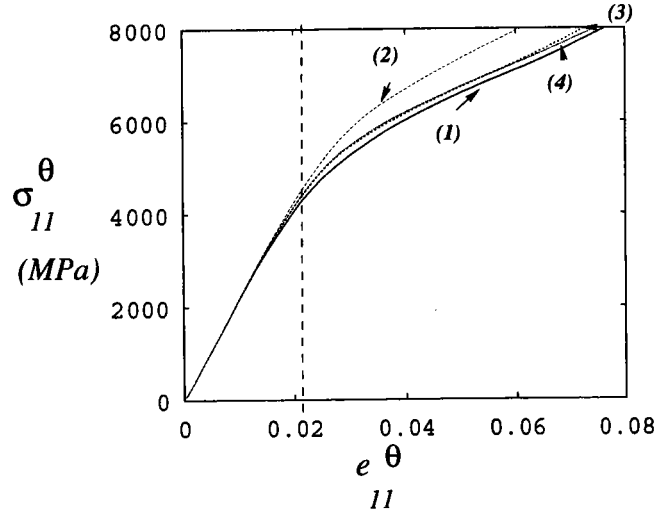


FIG. 29.5 – Evolution de la moyenne de contraintes avec la déformation moyenne dans la cémentite perlitique. Les simulations de traction sont effectuées pour 100 îlots, selon un modèle de Taylor-Lin, dont les lamelles sont orientés selon la figure 29.1.

29.2.2 Cisaillement

Dans le cas du cisaillement, le contexte des modifications d'orientation des lamelles est différent. En effet, la configuration $n^{\circ}4$ correspond à un ensemble d'îlots dont les plans des lamelles sont quasiment parallèles au plan de cisaillement. On observe alors une hétérogénéité croissante de la déformation dans les lamelles avec l'alignement des plans avec celui du cisaillement. Le comportement de la ferrite est essentiellement associé à l'accommodation de la déformation macroscopique, avec un comportement local de la cémentite très différent d'une configuration ($n^{\circ}1$) à l'autre ($n^{\circ}4$), voir figure 29.7. Les résultats de la simulation montre que dans cette dernière configuration des lamelles ($n^{\circ}4$), la cémentite ne se déforme presque pas en moyenne et reste élastique tout le long du cisaillement macroscopique. Plus les lamelles sont alignées dans le plan de cisaillement, plus l'accommodation de la ferrite est déterminante, et moins la cémentite se déforme. Toutefois, on peut noter que dans les configurations $n^{\circ}2$ et $n^{\circ}3$, le comportement local moyen de la cémentite présente un phénomène de saturation (ou 'striction?') due à la forte hétérogénéité de la déformation entre les deux phases au moment de l'entrée du renfort dans le domaine plastique. Tout se passe comme si la plasticité tardive de la cémentite générerait une accommodation supplémentaire de la ferrite qui alors durcit considérablement.

La cémentite présente un comportement ductile plus précoce en cisaillement qu'en traction.

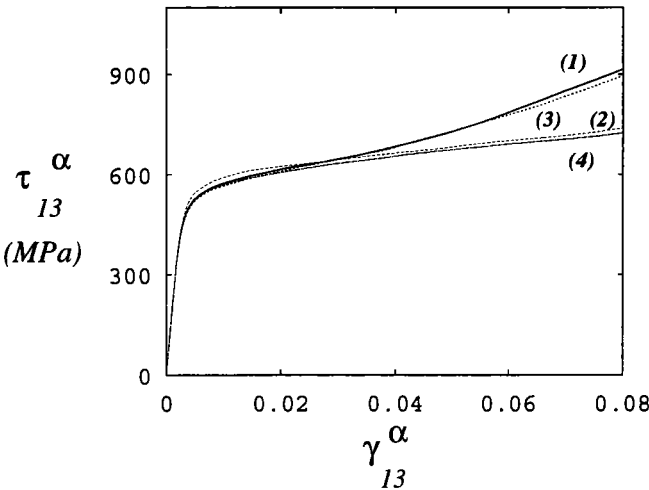


FIG. 29.6 – Evolution de la moyenne des cissions avec le cisaillement moyen dans la ferrite perlitique. Les simulations de cisaillement sont effectuées pour 100 îlots, selon un modèle de Taylor-Lin, dont les lamelles sont orientés selon la figure 29.1.

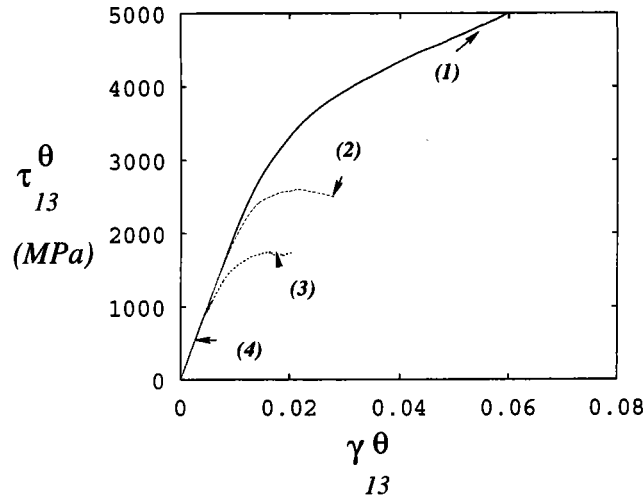


FIG. 29.7 – Evolution de la moyenne des cisssions avec le cisaillement moyen dans la cémentite perlitique. Les simulations de cisaillement sont effectuées pour 100 îlots, selon un modèle de Taylor-Lin, dont les lamelles sont orientés selon la figure 29.1.

29.3 Hétérogénéités de déformation

29.3.1 Traction

Au cours de la traction, l'hétérogénéité de la déformation entre les constituants de la perlite est relativement faible, un peu moins de 10% de la déformation macroscopique (figure 29.8), pour la configuration n°1 (c'est à dire des lamelles désorientées par rapport à l'axe de traction). Dans les autres configurations (c'est à dire, des îlots possédant des lamelles approximativement alignées avec l'axe de traction), l'hétérogénéité de la déformation entre les phases est moindre, et l'accommodation de la déformation macroscopique est réalisées par une contribution équivalente (en déformation) des constituants.

29.3.2 Cisaillement

Au cours du cisaillement, les effets sont beaucoup plus marqués. En effet, l'incompatibilité de la déformation devient énorme pour des îlots dont les lamelles sont parallèles au plan de cisaillement (voir figure 29.8, configuration n°4). En effet, dans cette configuration, plus les lamelles sont alignées vers le plan de cisaillement, plus la ferrite est susceptible d'accommoder seule la déformation (mécanisme hétérogène à l'échelle de l'îlot du 'paquet de cartes').

29.3.3 Conclusion

L'importance de l'anisotropie de comportement liée à la morphologie de l'îlot perlitique (e.i. et orientation) est caractérisée et peut être déterminante dans le comportement de la perlite, en liaison avec le comportement de chaque constituant et surtout avec l'incompatibilité de déformation plastique à l'interface entre lamelles.

Ce résultat montrent que l'approximation d'une moyenne de Taylor-Lin sur 100 îlots n'est

probablement pas la meilleure opération de moyenne à faire pour la perlite. Il semble en effet, que la prise en compte des hétérogénéités à l'échelle des phases n'est pas suffisante : les îlots 'méso-homogènes' présentent des comportements très différents ; la ductilité d'un îlot étant fortement conditionnée par la morphologie (e.i. et orientation) et la cristallographie des phases.

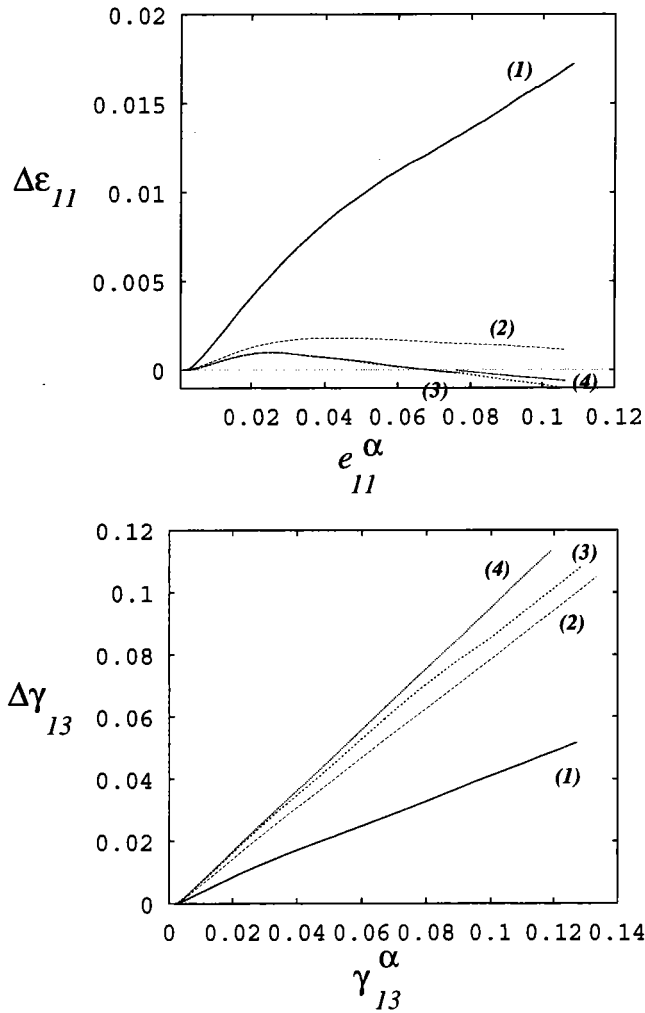


FIG. 29.8 – (En haut) Evolution du saut moyen de déformation entre la ferrite et la cémentite perlitique, avec la déformation de traction moyenne dans la ferrite. (En bas) Evolution du saut moyen de déformation de cisaillement entre la ferrite et la cémentite perlitique, avec la déformation de cisaillement moyenne dans la ferrite. Les simulations de cisaillement sont effectuées pour 100 îlots, selon un modèle de Taylor-Lin, dont les lamelles sont orientés selon la figure 29.1.

29.4 Contraintes Internes

Le modèle proposé permet d'estimer les contraintes et déformations internes, après déformation de traction ou de cisaillement puis décharge élastique, dans les deux constituants de la perlite. On effectue une moyenne de Taylor-Lin sur les cents îlots de textures morphologique et cristallographique isotropes.

29.4.1 Traction

Dans ce cas, lors de la traction, la ferrite exhibe une contrainte négative dans la direction de traction. On remarque que le couplage de la déformation des deux constituants mène à une modification de la répartition des contraintes internes lorsque la cémentite commence à plastifier. A ce stade, l'accommodation de la déformation globale provoque la rotation des réseaux cristallins des deux constituants, favorisant alors la déformation de la cémentite, à une contrainte plus faible. Si on voulait rapprocher les mesures de contraintes obtenues par diffraction à la répartition obtenue ici, il est nécessaire de rappeler qu'à 7 GPa de contrainte interne moyenne dans la cémentite, il est probable qu'une partie au moins de ces lamelles de renfort atteignent la limite à la rupture. On ne prend pas en compte un tel phénomène ici, mais on montre l'importance de la prise en compte de l'accommodation interphase de la déformation. La répartition des déformations permanentes montre ici que la ferrite se déforme deux fois plus que la cémentite lors de la traction.

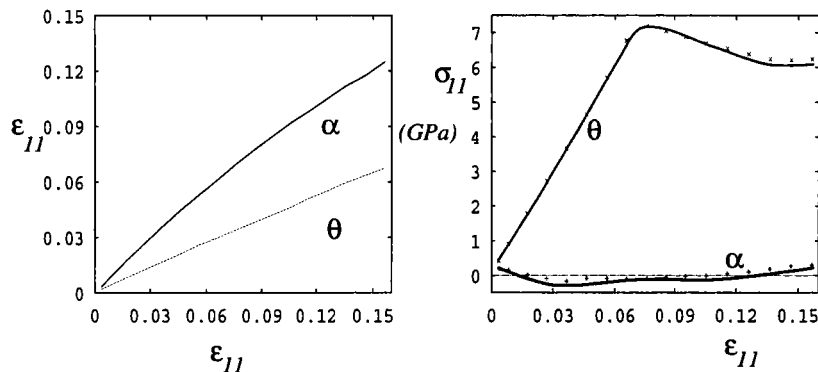


FIG. 29.9 – Evolution de la déformation et de la contrainte permanentes (internes) dans chaque phase après relaxation macroscopique. Les simulations de traction sont effectuées pour 100 îlots, selon un modèle de Taylor-Lin.

29.4.2 Cisaillement

Dans le cas du cisaillement, la déformation de cisaillement dans la ferrite suit presque celle de la perlite. On peut remarquer que l'inhomogénéité de la déformation entre constituants est plus faible dans le cas du cisaillement que dans le cas de la traction. Les contraintes internes estimées montrent la même propriété que dans le cas de la traction. Dès que la cémentite est cisailée, l'accommodation élastoplastique de la déformation diminue la contrainte interne dans la cémentite avec la déformation. Par couplage, la ferrite présente un état de contrainte interne

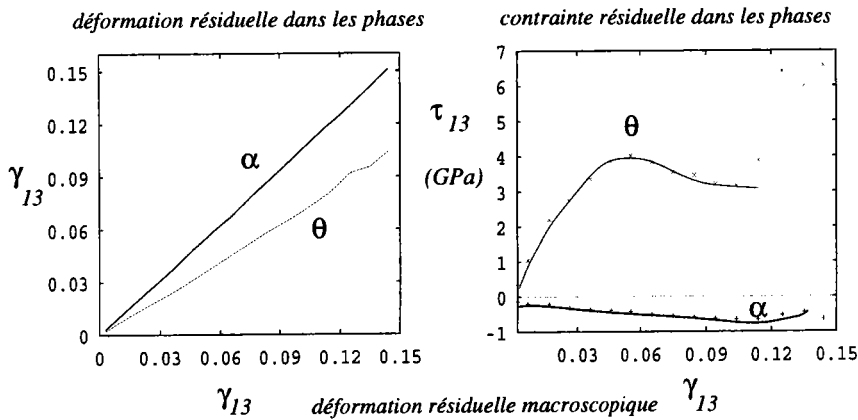


FIG. 29.10 – Evolution du cisaillement et de la cission permanents (internes) dans chaque phase après relaxation macroscopique. Les simulations de cisaillement sont effectuées pour 100 îlots, selon un modèle de Taylor-Lin.

de plus en plus fort (cission interne négative). Au-delà de 10% de déformation de cisaillement, il est probable que des lamelles de cémentite présentent de fortes strictions, voire des microfissures ; l'hypothèse d'homogénéité des phases n'est alors plus vraie.

La cohérence des résultats obtenus dans le cas du cisaillement et de la traction permet d'appuyer la démarche proposée. Nous allons voir maintenant si le modèle ainsi construit décrit bien le comportement de l'acier perlitique industriel que nous avons étudié dans la deuxième partie de ce mémoire.

29.5 Traction des fils industriels

Comme on l'a observé dans le paragraphe 9.5.1, les modifications d'e.i. sont faibles pour la nuance 2. Si parmi les données de la simulation, on ajoute environ 20 MPa à la cission critique τ_{α}^c sur les systèmes de glissement de la ferrite, on observe une bonne corrélation entre simulation et expérience.

Pour le cas de la nuance 3, les modifications d'e.i. sont par contre déterminantes. En associant à la simulation la valeur de l'e.i. apparent obtenu expérimentalement (soit 120nm par rapport à 145nm pour la nuance 2 et 150nm pour la nuance 1), et un durcissement par solution solide dans la ferrite d'environ 30 MPa (donc inférieur à $60 \cdot 0.77 = 45$ MPa), on montre qu'il est nécessaire de modifier le paramètre k^{θ} , représentatif de la résistance de l'interface au mouvement des dislocations de la cémentite : pour corrélérer expérience et simulation, la valeur de k^{θ} est réduite aux 4/5ième de sa valeur initiale (pour les simulations des nuances 1 et 2). Cet effet peu être associé à la présence d'amas de cuivre à l'interface qui 'adoucit' l'interface-obstacle par rapport aux mouvement des dislocations de la cémentite ou alors à une modification significative de la longueur des lamelles (dégénérescence de la perlite).

Les courbes issues de la simulation semblent être plus 'arrondie' lors de la transition élastique-plastique que dans le cas réel : cette observation peut être associée à l'hypothèse de moyenne effectuée : dans le cas d'une moyenne de Taylor-Lin, tous les îlots sont sollicités de la même façon, sans prendre en compte le caractère 'méso-hétérogène' d'un ensemble d'îlots. Un processus d'homogénéisation plus adapté ici nécessiterait une démarche du type autocohérente.

Si la corrélation entre expérience et simulation reste correcte, on peut supposer qu'un mo-

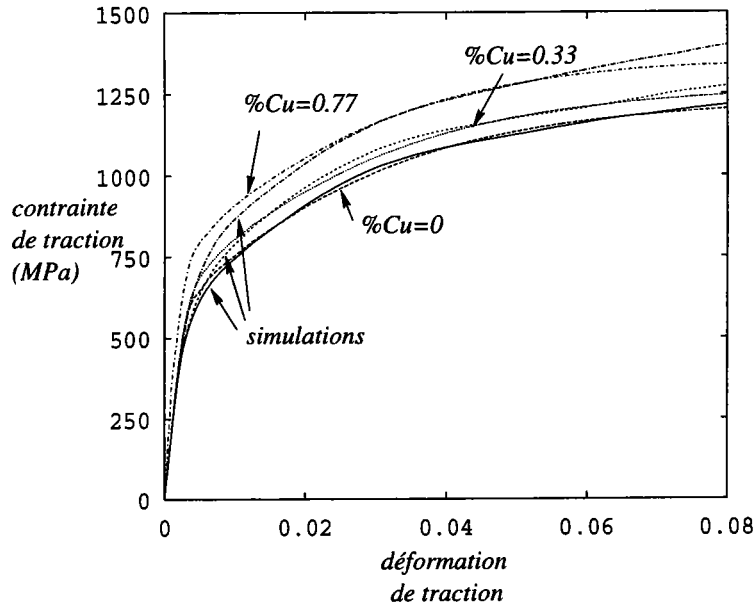


FIG. 29.11 – Comportement en traction des fils perlitiques industriels enrichis en cuivre (cas des nuances 1,2 et 3). Les simulations de traction sont effectuées pour 100 îlots, selon un modèle de Taylor-Lin.

dèle prenant en compte l'hétérogénéité de la déformation de la perlite à l'échelle des îlots (par exemple, un modèle autocohérent plutôt que la moyenne grossière de Taylor-Lin) permettrait une meilleure représentativité des phénomènes, sur un plus grand nombre d'îlots.

Enfin, en introduisant le phénomène de micro-fissuration qui a lieu dans la perlite aux derniers stades de la déformation en traction, il serait possible de prévoir la résistance mécanique de la perlite, ainsi que la striction.

29.6 Courbe d'écrouissage des fils perlitiques

Allons un peu plus loin dans l'application du modèle. Si on se base sur le principe de similitude appliqué au tréfilage de la perlite, il est possible de lier l'espacement interlamellaire à la déformation de tréfilage, selon :

$$\lambda_p = \lambda_p^0 \exp(-\epsilon_t/2)$$

Dans ce cas, il est possible de simuler un essai de traction sur un ensemble de 100 îlots possédant l'e.i. correspondant à une déformation de tréfilage donnée. Cette approche ne prend pas en compte la texture de tréfilage. Si on résume l'effet de la mise en forme en tréfilage à une simple réduction du libre parcours moyen des dislocations dans la perlite, on obtient l'évolution de la résistance du fil en fonction du taux de tréfilage. La figure 29.12 représente la résistance de la perlite à différentes déformations de traction, après une prédéformation en tréfilage (ici sans la texture) donnée. Plusieurs observations peuvent être faites :

- la résistance mécanique à 0.2% de déformation de traction sature rapidement ($\epsilon_t = 1$) ;
- la résistance mécanique à 1% de déformation de traction semble présenter une pseudo-saturation (relation linéaire?) plus tardivement ($\epsilon_t = 5 - 6$) ;

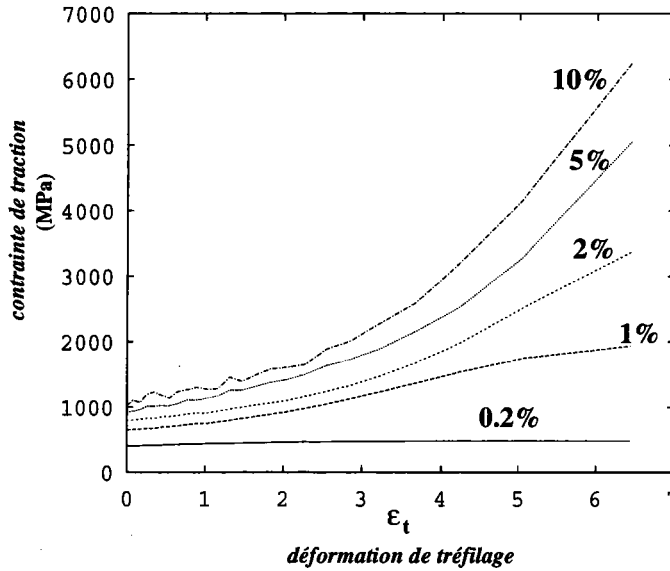


FIG. 29.12 – Comportement en tréfilage d'un fil perlitique. Les simulations de traction sont effectuées pour 100 îlots, la déformation de tréfilage est liée à l'e.i. selon le principe de similitude.

- au-delà de 2% de déformation de traction, la résistance de la perlite évolue en relation avec la déformation de tréfilage de manière exponentielle ;
- à 10% de déformation de traction, d'importantes fluctuations sont visibles pour des déformations de tréfilage inférieures à 2.

Il est possible d'interpréter ces observations selon les caractéristiques locales de l'écoulement plastique. Si la résistance à 0.2% présente une saturation rapide, c'est que la limite d'élasticité du matériau global est atteinte pour des déformations de traction supérieures à 0.2%. Dans ce cas, la valeur de saturation correspond à la contrainte associée au comportement élastique du matériau pour 0.2% d'élongation.

L'évolution de la résistance à 1% de déformation de traction correspond alors à l'écrouissage de la ferrite (qui seule plastifie à ce niveau). On peut supposer que la pente de la courbe présente les caractéristiques de l'écrouissage de la ferrite dans la perlite au cours de la traction. On rappelle qu'ici, la texture de tréfilage n'est pas prise en compte.

A 2% de déformation de traction, les caractéristiques de l'évolution de la résistance mécanique avec la prédéformation en tréfilage semblent similaires à l'évolution observée pour la résistance à 1%. Toutefois, l'écart mesuré entre les résistance à 1% et 2% augmente avec la prédéformation en tréfilage : ceci laisse à penser qu'il y a une contribution inélastique déjà non négligeable de la cémentite à l'écrouissage de la perlite.

Les fluctuations de résistance mécanique à 10% de déformation de traction, pour des faibles prédéformations de tréfilage correspondent aux modifications des cisssions critiques sur les systèmes de glissement, liée aux modifications morphologiques. En effet, pour une prédéformation en tréfilage faible, la contribution de la modification de l'e.i. est du même ordre de grandeur que la cisssion critique isotrope (τ_c^0) (au moins jusqu'à $\epsilon_t=2.5$) : les légères fluctuations de l'e.i. génère de légères modifications à l'échelle locale de l'anisotropie cristalline, qui conditionne fortement la réponse du matériau à la sollicitation. Pour des prédéformations en tréfilage supérieures, l'effet de la modification du libre parcours moyen (ou e.i.) est prépondérant, et l'évolution de la résistance

est exponentielle.

Pour caractériser l'écrouissage en tréfilage de la perlite, nous avons vu qu'il est pratique

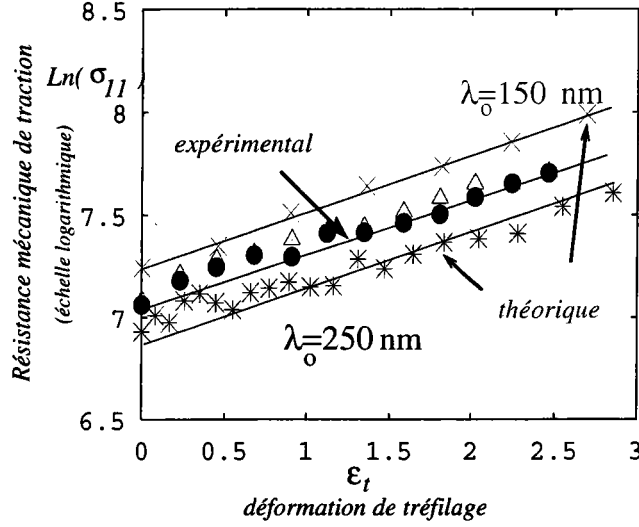


FIG. 29.13 – Courbe d'écrouissage simulée pour un fil perlitique tréfilé d'espacement initial de 250nm. Les simulations de traction sont effectuées pour 100 îlots, la déformation de tréfilage est liée à l'e.i. selon le principe de similitude. Comparaison avec l'expérience.

de reporter le logarithme népérien de la résistance mécanique (celle à 10% de déformation de traction) en fonction de la prédéformation de tréfilage. Dans ce cas, on montre que la simulation s'accorde bien avec l'expérience : on observe effectivement une évolution du type linéaire, avec une pente d'environ 1/4. Nous avons vu que l'estimation de cette pente est associée à deux équations : l'une, la relation de Hall-Petch macroscopique,

$$\sigma_{perlite} = \frac{k^{H-P}}{\sqrt{\lambda_p}}$$

et l'autre, basée sur le principe de similitude en tréfilage relie la prédéformation de tréfilage à l'e.i. selon

$$2Ln(\lambda_p^0/\lambda_p(\epsilon_t)) = \epsilon_t$$

Dans le cas de la simulation, la prise en compte de l'effet de libre parcours moyen est locale, associée au mouvement discret des dislocations (pas d'empilement statistique), puisque l'effet d'e.i. est introduit à l'échelle des systèmes de glissement des constituants (distribution des cissions critiques sur les plans de glissement). La corrélation entre expérience et simulation montre qu'en associant la déformation de la perlite essentiellement à l'incompatibilité de déformation entre constituants, on obtient une bonne description du comportement au tréfilage de l'acier perlitique. Le tréfilage a donc bien un effet de modification du libre parcours moyen, prépondérant par rapport à la texture cristallographique développée lors de la mise en forme.

La controverse existante sur la question de la dépendance des propriétés mécaniques avec l'e.i. (quelle relation de Hall-Petch ?) est ici résolue : en effet, si on associe macroscopiquement le comportement de la perlite à une loi de Hall-Petch, cela ne signifie pas que localement, le mode de déformation correspond à un empilement de dislocations. La relation locale (sur le plan de

glissement g) que nous avons utilisée ici

$$\tau^{c_g} \propto \frac{k(\mathbf{m}^g, \mathbf{s}^g)}{\lambda_p}$$

correspond à une accommodation des incompatibilités de déformation à l'interface entre ferite et cémentite, notamment par la germination et la croissance de boucles (dénombrables) de dislocations sur des plans rapprochés mais distincts. Cette description des mécanismes élémentaires déterminants pour la déformation de la perlite correspond au mode décrit par Embury [2], Langford [4], Louchet [19] et Guelton [71].

Conclusion

L'incohérence entre la relation macroscopique de Hall-Petch et les micromécanismes de déformation déterminants dans les constituants de la perlite n'est qu'apparente. En effet, il est imprudent d'associer à une relation moyenne un mécanisme élémentaire de déformation : la relation de Hall-Petch macroscopique n'induit pas la formation d'empilements de dislocations. Nous montrons dans ce travail que l'écroutissage par tréfilage de la perlite est directement lié à la réduction du libre parcours moyen des dislocations, autrement dit, celle de l'e.i.

On retrouve bien les effets (directs et indirects) du cuivre résiduel sur le comportement en traction des fils perlitiques patentés. Le couplage entre modifications morphologiques et états de précipitation du cuivre est alors relativement bien cerné.

On montre que le comportement en traction de la perlite peut se décomposer en trois domaines, associés respectivement à la plasticité successive des constituants. En cisaillement, les effets de l'orientation des lamelles sont caractérisés et montrent une large modification du comportement local de la cémentite. Il semble que l'incompatibilité à l'interface entre phases constitutives est très variable d'un îlot à l'autre, toujours en raison des relations d'orientation entre ferrite et cémentite et l'orientation de l'interface par rapport au chargement macroscopique.

L'opération d'homogénéisation effectuée et l'extension de la borne de Hashin-Strikman au cas élastoplastique semble bien décrire le comportement mésoscopique de la perlite. Il serait intéressant à ce niveau de prendre en compte les hétérogénéités mésoscopiques (fictives) d'ordre II dans la perlite (composite poly-îlot) et donc d'adopter un modèle autocohérent pour réaliser une étape supplémentaire d'homogénéisation.

Enfin, le nombre de paramètres pris en compte ici donne une certaine cohérence au modèle, puisque leur valeur respective est associée aux mécanismes ou structures sous-jacents : il n'y a pas d'identification phénoménologique de paramètres supplémentaires. On détermine par méthode inverse le comportement de la cémentite dans la perlite.

Conclusion Générale

Les propriétés mécaniques exceptionnelles de l'acier étudié, soient quelques GPa de résistance mécanique, sont liées à l'échelle de la microstructure : après quelques passes en tréfilage, la longueur caractéristique du nanomatériau est de l'ordre de quelques 10nm. La ductilité résultante de la mise en forme peut s'expliquer par un caractère plus homogène -comparé à celui d'une perlite grossière- du glissement plastique dans les lamelles. L'écrouissage en tréfilage de la perlite peut être expliqué en terme de réduction du libre parcours moyen des dislocations avec le taux de réduction du diamètre du fil. Le mécanisme élémentaire de déformation associé à la déformation de la perlite correspond à une charge par des lignes de dislocations individuelles (pas d'empilement) du renfort, la cémentite. Les principaux effets de la mise en forme de l'acier perlitique est la modification de l'espacement interlamellaire, les textures cristallographique ($\langle 110 \rangle_\alpha$ dans l'axe du fil) et morphologique. Le modèle d'écrouissage en tréfilage proposé ici prend en compte la texture morphologique de la perlite à travers une approche micromécanique de l'inclusion d'Eshelby-Kröner à frontière mobile. Les mécanismes élémentaires de déformation déterminés en métallurgie physique servent de base pour l'interprétation des résultats de ce premier modèle. Le modèle macroscopique ne prend pas en compte la texture cristallographique de tréfilage.

On montre ici qu'en choisissant l'échelle appropriée (la plus fine) pour décrire les phénomènes déterminant le comportement mécanique d'un matériau, on atteint une assez bonne description des propriétés globales de ce matériau. En particulier, la méthode de transitions d'échelles apporte des informations supplémentaires sur l'état de contrainte interne du matériau et donc du comportement de chaque constituant. Si l'on illustre le premier point, ce travail mène à la conclusion que l'échelle de description adaptée de la perlite est celle du comportement individuel des dislocations : on déduit des mécanismes élémentaires impliqués l'évolution de la cission critique sur un système de glissement en fonction de la géométrie locale d'accrolement des phases et de la morphologie de l'îlot. La relation déterminante à cette échelle s'écrit alors, pour un système de glissement g de la ferrite (par exemple) :

$$\tau_g^c(\lambda^g) = \frac{k^g}{\lambda^g}$$

où λ^g est la valeur de la projection de l'e.i. sur le plan de glissement et k^g dépend de la géométrie locale du glissement, des propriétés métallurgiques du glissement et de la taille de l'îlot. Le second point permet d'obtenir une description précise du comportement local des phases, en particulier, celui de la cémentite.

En effet, l'originalité de ce travail est lié à une hypothèse forte du modèle macroscopique : la cémentite est supposée s'écouler plastiquement dans la perlite. Les raisons de ce choix sont liées aux diverses observations métallurgiques d'affinement des lamelles de cémentite, ainsi que leur cisaillement. Etant donnée l'échelle de la microstructure, cette hypothèse semble raisonnable dans le cas du tréfilage. La mise en forme à froid génère une accommodation élastoplastique du matériau global : si la ferrite s'écoule plastiquement à la même déformation que le matériau global, la cémentite n'entre en plasticité qu'après environ 3% de déformation en traction et 1% environ en cisaillement. Le comportement de la cémentite est déduit par méthode inverse, en comparant les courbes macroscopiques simulées aux courbes expérimentales (en traction). L'avantage de décrire le comportement de chaque phase dans un formalisme incrémental, en transformation finie, apparaît évident lorsqu'on observe les estimations de contraintes internes. Il semble que la cémentite -lorsqu'elle plastifie- modifie le comportement de la ferrite -qui durcit- par un 'transfert de charge' et la cémentite se relaxe. L'état de contraintes internes du matériau devient alors moins hétérogène et l'ensemble des lamelles supporte une large résistance. Les valeurs élevées des

contraintes internes dans la cémentite (particulièrement en traction) s'approchent considérablement de la valeur théorique $\mu/2\pi$: il est alors possible de supposer que ces contraintes internes sont en partie à l'origine du phénomène de dissolution de la cémentite observé dès les premières passes en tréfilage. La dissolution de la cémentite est alors liée à un phénomène de diffusion du carbone assisté par la contrainte.

Il est possible de décrire globalement et localement le comportement du matériau. Cette prévision des propriétés macroscopiques est basée sur une description idéale de la microstructure : l'îlot constitue le grain de la perlite. Il est caractérisé par des lamelles alternées parallèles dont on connaît l'épaisseur et la longueur. S'il est vrai que le processus industriel de formation de l'acier de référence est bien maîtrisé, l'introduction d'éléments résiduels du recyclage dans la composition chimique de l'acier modifie les conditions de température de transformation et donc la microstructure. Dans le cas étudié, la diminution de la vitesse de refroidissement de l'acier sur le train à fil est responsable de la formation de zones hétérogènes dans le matériau témoin. Il faut noter ici que les conditions de réalisation de ces essais sont exceptionnelles²⁴ : la vitesse normale de refroidissement de l'acier est d'environ $35^{\circ}\text{C} \cdot \text{s}^{-1}$ alors que nous avons réalisé un refroidissement sur train à fil de moins de $5^{\circ}\text{C} \cdot \text{s}^{-1}$. Ces conditions expérimentales provoquent l'augmentation de la température de début de transformation et donc la formation de perlite dégénérée. Cet effet est bien entendu accentué par la présence de cuivre. Il est donc important d'effectuer une étude supplémentaire de la nuance intermédiaire (à 0.3%Cu) dans les conditions optimales de transformation industrielle (soit une vitesse de refroidissement de l'ordre de $30^{\circ}\text{C} \cdot \text{s}^{-1}$) pour évaluer le degré d'hétérogénéité de la perlite en comparaison avec les exigences des industriels.

La séparation en une partie directe et une partie indirecte des effets du cuivre, bien qu'arbitraire, semble adaptée en première approximation pour évaluer l'évolution des propriétés macroscopiques avec l'enrichissement en cuivre. L'effet direct comprend la contribution au durcissement par solution solide du cuivre dans la ferrite. Il est probable que la cémentite contienne du cuivre, en contradiction avec les données thermodynamiques. L'effet indirect contient l'évolution de la morphologie de la perlite, soit l'e.i., avec l'enrichissement en cuivre. Il est qualifié d'indirect car il modifie directement la cinétique de transformation de la perlite, qui a pour conséquence la modification des paramètres morphologiques. La vitesse de refroidissement au train à fil est le paramètre cinétique déterminant. Nous montrons qu'il est nécessaire de la réduire au maximum ($5^{\circ}\text{C} \cdot \text{s}^{-1}$) pour la nuance d'acier la plus enrichie en cuivre (formation de martensite). La température de début de transformation perlitique est alors considérablement supérieure à celle obtenue pour la nuance de référence dans un processus industriel optimisé (où la vitesse de refroidissement est de l'ordre de $35^{\circ}\text{C} \cdot \text{s}^{-1}$). Cet effet indirect a pour conséquence la formation de perlite dégénérée et rend la transformation hétérogène. Dans ce cas, le modèle nécessite d'inclure la contribution de la perlite dégénérée au comportement macroscopique du matériau. On peut supposer que la fragmentation des lamelles de cémentite contribue à une nucléation des dislocations plus favorable. Dans ce cas, les grains de perlite dégénérée sont plus ductiles que les îlots. Cette propriété de la perlite dégénérée met en évidence l'importance du rôle des interfaces planes. En particulier, nous observons une densité importante d'amas nanométriques de cuivre sur les interfaces entre lamelles de la nuance 3. Il est probable que ces amas se retrouvent dans la microstructure de la nuance intermédiaire. En effet, le processus de formation de ces amas est probablement lié à un mécanisme de diffusion accélérée sur les défauts ou l'interface. Le rôle de ces amas nanométriques serait de distribuer le glissement entre les deux phases de façon plus

²⁴paramètres industriels mais aussi le lieu - Longwy - pour les nostalgiques

homogène, au moins aux premiers stades de tréfilage, pendant lesquels ils sont dissous. Cet effet serait responsable de la ductilité à la rupture surprenante de la nuance intermédiaire. La nuance la plus enrichie présente probablement une martensite résiduelle non négligeable.

L'interface entre lamelles semble donc être le principal lieu de l'accommodation élastoplastique entre les phases. On peut alors supposer, à l'appui des observations métallurgiques, que le densité de dislocations dans les lamelles est négligeable. Cette description de la microstructure s'adapte alors parfaitement au formalisme de la mécanique des milieux continus. Chaque lamelle est supposée être homogène et se déformer de façon homogène. Cette hypothèse est propre au cas d'une perlite fine ou tout autre matériau à microstructure lamellaire de type perlite avec une longueur caractéristique ou e.i. suffisamment faible devant le libre parcours moyen des dislocations.

L'essentiel des phénomènes déterminants a lieu à l'interface entre deux lamelles adjacentes. Il est donc possible d'écrire dans le formalisme approprié les relations entre les champs de vitesses et de contraintes de part et d'autre de l'interface. Cette étape est résolue de façon exacte à l'aide des opérateurs interfaciaux introduits par Hill. On obtient ici une mesure de l'hétérogénéité de la déformation à l'interface au cours d'un chargement macroscopique (ou mésoscopique) quelconque. Lors d'une simulation de traction ou du cisaillement, la géométrie cristalline des constituants de la perlite et l'orientation du plan des lamelles sont prises en compte. On caractérise ainsi l'hétérogénéité de la déformation élastoplastique entre les lamelles de ferrite et de cémentite d'un îlot. Celle-ci est fortement dépendante des relations d'orientation entre les constituants et de la déviation du plan d'habitat apparent : l'interface joue alors le rôle d'un obstacle plus ou moins résistant, et le coefficient -qui lie l'e.i. à la cission critique de glissement plastique (et que l'on ne devrait plus associer à Hall-Petch) en est une mesure. L'effet du recyclage sur la microstructure et le comportement de la perlite en est un bon exemple, puisque la décoration de l'interface entre lamelles par des amas mixtes cisailables de cuivre contribue à rendre l'interface moins résistante.

A l'échelle de chaque lamelle, l'accommodation élastoplastique ou le stockage des dislocations à l'interface a pour conséquence une rotation de tout le monocristal par rapport au repère de sollicitation et au plan des lamelles. Cet effet devient déterminant lorsque la cémentite entre en plasticité ; l'activation de systèmes de glissement dans la cémentite a pour conséquence une relaxation des contraintes qui en retour va durcir la ferrite. Tout se passe comme si les énormes contraintes internes portées par la cémentite élastique se relaxaient en partie dans la cémentite devenue élastoplastique, et en partie dans la ferrite. La conséquence de ce transfert de charge est le durcissement de la ferrite et la diminution de l'hétérogénéité de déformation entre les phases. Les contraintes internes dans le matériau atteignent des valeurs proches de la valeur théorique $\mu/2\pi$. De telles contraintes peuvent alors être le moteur d'un processus de diffusion du carbone sous la forme d'atmosphères de Cottrell : les dislocations qui cisailent la ferrite transportent simultanément une quantité non négligeable de carbone. Ce processus peut être en partie responsable de la dissolution de la cémentite et de la formation d'une ferrite enrichie en carbone ; il présente certaines similarités avec le phénomène de "mechanical alloying" qui a lieu par exemple dans lors du tréfilage intense des composites filamentaires cuivre-nobium.

La méthode de transition multiple d'échelles semble adaptée à la compréhension des phénomènes physiques sous-jacents et donne une mesure locale des contraintes conséquente de la sollicitation globale du matériau. La pluridisciplinarité de ces travaux montre ici toute sa richesse. Toutefois, plusieurs aspects de ce modèle global demande un développement plus important. Par

exemple, l'évolution de l'orientation de l'interface au cours de la sollicitation de l'îlot n'a pas été présentée ici. De même, bien qu'elle soit prise en compte, la rotation de chaque monocristal et la texture cristallographique résultante n'est pas étudiée. Le choix des systèmes de glissement de la cémentite peut être plus adapté aux observations métallurgiques et on peut introduire en plus l'anisotropie élastique du système orthorhombique. L'approche micromécanique peut être complexifiée à l'échelle la plus fine : par exemple, le caractère local de la dislocation (coin, vis ou mixte) peut générer une différence de glissement local de la boucle de dislocation etc. Enfin, les modèles d'écrouissage du monocristal, pris ici sous la forme la plus simplifiée, sont susceptibles d'apporter un complément nécessaire pour prendre en compte d'autres types d'écoulement.

Cependant, la perspective la plus immédiate semble être celle de l'échelle mésoscopique. En effet, on a mis en évidence dans ce travail l'importance de la texture morphologique de la perlite. Le comportement de chaque îlot a des conséquences sur l'ensemble des îlots du voisinage. De la sorte, il serait tout à fait intéressant d'introduire ces 'grains' de perlite dans un modèle auto-cohérent où les interactions entre "grains" à l'échelle mésoscopique est prise en compte. Dans ce cadre là, l'étude de l'effet de la texture de tréfilage sur le comportement de la perlite pourrait être réalisée. A l'échelle supérieure, l'introduction d'une telle microstructure dans un calcul de structure permettrait de mieux comprendre et donc prévoir le comportement de la perlite en tréfilage.

D'autres perspectives s'ouvrent à ce travail, puisque ce modèle peut s'adapter à tout composite de type perlite fine, comme par exemple les composites titane-aluminium ou tout autre matériau poly-îlots cristallins.

Bibliographie

-
- [1] J.D. Embury and R.M. Fisher, *Acta Metallurgica*, 14, 1966, 147-159.
 - [2] J.D. Embury, **Micromechanical descriptions of heavily deformed materials**, *Scripta Metallurgica et Materialia*, 27, 1992, 981-986.
 - [3] G. Langford, *Metallurgical Transactions A*, 1, 1970, 465-477.
 - [4] G. Langford, **Deformation of pearlite**, *Metallurgical Transactions A*, 8A, 1977, 861-875.
 - [5] N. Ridley, *Metallurgical Transactions A*, 15A, 1984, 1019-1036.
 - [6] J. Gil Sevillano, , *5th International Conference on the Strenght of Metals and Alloys (ICSMA5)*, 1979, P. Haasen and V Gerold and G. Kostorz, Pergamon Press, Aachen, Germany.
 - [7] P.R. Howell, *Materials Characterization*, 40, 1998, 227-260.
 - [8] A. Hultgren and H. Öhlin, *Jernkont. Ann.*, 5, 1956, 5.
 - [9] K.L. Maurer and D.H. Warrington, *Phil. Mag.*, 15, 1967, 321-327.
 - [10] K.L. Maurer and D.H. Warrington, *Trans. JIM*, 1976, 663-672.
 - [11] K. Yu Okishev and D.A. Mirzaev and V.M. Schastlitsev and I.L. Yakovleva, *The physics of Metals and Metallography* , 85, 2, 1998, 218-222.
 - [12] H.C.H. Carpenter and J.M. Robertson, *JISI*, 125, 1932, 309-328.
 - [13] L.S. Darken and R.M. Fisher, , **Decomposition of Austenite by Diffusional Processes**, V.F. Zacking and H.I. Aaronson, Interscience, 1962, 249.
 - [14] M.P. Puls and J.S. Kirkaldy, *Metallurgical Transactions*, 3, 1972, 2777.
 - [15] J.S. Kirkaldy, *Scripta Metallurgica*, 2, 1968, 565.
 - [16] B.E. Sundquist, *Acta Metallurgica*, 16, 1968, 1413-1427.
 - [17] P.R. Williams and M.K. Miller and P.A. Beaven and G.D.W. Smith, , *Conference on Phase Transformation*, 1979, Inst. of Metallurgists Conf., York, N.Y., USA, 2, 11.
 - [18] J.D. Eshelby, **The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion**, 1957, *Proc. Roy. Soc.*, 376, A241.
 - [19] M. Janecek and F. Louchet and B. Doisneau-Cottignies and Y. Brechet and N. Guelton, *Phil. Mag.* , 1, 1999, .
 - [20] K. Van Acker and J. Root and P. Van Houtte and E. Aernoudt, **Neutron diffraction measurement of the residual stress in the cementite and ferrite phases of cold drawn steel wires**, *Acta mater.*, 44, 10, 4039-4049 1996, .
 - [21] M. Berveiller and A. Zaoui, **Méthodes self-consistantes en mécanique des solides hétérogènes, comportement rhéologique et structure des matériaux**, C. Huet and A. Zaoui, 175, 1981.
 - [22] R. Hill , *J. Mech. Phys. Solids*, 9, 155, 1961.
 - [23] P. Lipinski and J. Krier and M. Berveiller, **Elastoplasticité des métaux en grandes déformations : comportement global et évolution de la structure interne**, *Revue de Physique Appliquée*, 25, 361, 1990.
 - [24] F. Louchet, **A few simple considerations on the specific plastic properties of nanoscaled multilayers and equivalent systems**, 7th Int. Symposium on Plasticity and its current applications, 1999, S. Kahn, York, Mexico, 585.
 - [25] A. Misra and M. Verdier and H. Kung and J.D. Embury and J.P. Hirth, *Scripta Materialia*, 41, 1999, 9, 973-979.

- [26] G.I. Taylor, **Plastic strains in metals**, J. Inst. Metals, 23A, 307, 1938.
- [27] I. Aubert (Regnier) and M. Berveiller, **Constrained and unstable expansion of dislocation loops using invariant formulation of the free energy**, Mechanics of materials, 1997, 26, 127.
- [28] J.P. Boehler, **Introduction to the invariant formulation of anisotropic constitutive equations**, 1979, ZAMM 59, 157.
- [29] J.P. Hirth, **a metre**, Metallurgical Trans., 1972, 3, 3047.
- [30] J. Toribio and E. Ovejero, Scripta Materialia, 39, 1998, 3, 323-328.
- [31] Wang Jong Nam and Min Bae, Materials Science and Engineering, 203, 1995, 278-285.
- [32] F.C. Frank and K.E. Puttick, Acta Metallurgica, 4, 1956, 206.
- [33] Y. Ohmori and A.I. Davenport and R.W.K. Honeycombe, Trans. Iron Steel Inst. (Japan), 12, 1972, 128.
- [34] D.F. Lutpon and D.H. Warrington, Metal Sci. J., 6, 1972, 200.
- [35] D.F. Lutpon and D.H. Warrington, Acta Metallurgica, 20, 1972, 1325.
- [36] T. Mura, **Micromechanics of defects in solids**, M. Nijhoff Publishers, 1982.
- [37] D.S. Zhou and G.J. Shiflet, Metallurgical Transactions A, 1991, 22A, 1349.
- [38] D.S. Zhou and G.J. Shiflet, Metallurgical Transactions, 1992, 23, 1259.
- [39] M.-X. Zhang and P.M. Kelly, Scripta Materialia, 1997, 37, 12, 2009.
- [40] C. Zener, AIME Trans., 1946, 12, 2009.
- [41] M. Hillert, Jernkont. Ann., 1957, 141, 757.
- [42] M. Hillert, Metallurgical Transactions, 1972, 3, 2729.
- [43] M. Hillert, **Importance of crystallography in growth of pearlite**, Scripta Metallurgica et Materialia, 1994, 31, 9, 1173.
- [44] A.R. Marder and B.L. Bramfitt, Metallurgical Transactions A, 1976, 7A, 365.
- [45] C.S. Smith, Trans. ASM, 1953, 45, 533.
- [46] M. Hillert, , **Decomposition of Austenite by Diffusional Processes**, V.F. Zacking and H.I. Aaronson, Interscience, 1962, 193.
- [47] J.W. Cahn and W.D. Hagel, , **Decomposition of Austenite by Diffusional Processes**, V.F. Zacking and H.I. Aaronson, Interscience, 1962, 131.
- [48] S.A. Hackney and G.J. Shiflet, Acta Metallurgica, 1987, 35, 5, 1007-1017.
- [49] S.A. Hackney and G.J. Shiflet, Acta Metallurgica, 1987, 35, 5, 1019-1028.
- [50] M.J. Whiting and P. Tsakiroopoulos, Scripta Metallurgica et Materialia, 1994, 30, 8, 1031-1036.
- [51] G. Langford and M. Cohen, Trans. Am. Soc. of Metals, 1969, 62, 623.
- [52] G. Sevillano, **Substructure and strengthening of heavily deformed single and two phase metallic materials**, J. Phys. III, 1991, 1, 967-988.
- [53] G. Sevillano, Mat. Science and Engineering, 1975, 21, 221.
- [54] D.A. Porter and K.E. Easterling and G.D.W. Smith, Acta Metallurgica, 1978, 26, 1405.
- [55] J.C.M. Li and Y.T. Chou, Metallurgical Trans., 1970, 1, 1970.

-
- [56] P. Hull and D.J. Bacon, **Dislocation Arrays and Crystal Boundaries**, Introduction to dislocations, 3rd ed. Elsevier Science Ltd, BPC Wheatons Ltd, 1984, 191.
 - [57] G. Spanos and H.I. Aaronson, *Acta Metallurgica et Materialia*, 1990, 38, 12, 2721-2732.
 - [58] A.W. Sleeswyk, 1223-1237.
 - [59] L. Klinger and Y. Bréchet and G. Purdy, *Acta mater.*, 1999, 47, 1, 325-332.
 - [60] O. Bouaziz and G. Salvador, Note IRSID, 1999.
 - [61] M. Dollar and M. Bernstein and A.W. Thompson, **Influence of deformation substructure on flow and fracture of fully pearlitic steel**, *Acta met.*, 1988, 36, 311-320.
 - [62] R.J. Dippenaar and R.W.K. Honeycombe, *Proc. R. Soc. London*, 455, 333, 1973.
 - [63] Y.A. Bagaryatsky, *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, 1161, 1950.
 - [64] I.V. Isaichev, *Zh. Tekh. Fiz.*, 17, 1950, 385.
 - [65] N.J. Petch, *Acta. Cryst.*, 10, 79, 1953.
 - [66] N.J. Petch, *Acta. Cryst.*, 10, 1962.
 - [67] P. Buessler, **La perlite, structure et propriétés**, IRSID MPM95.148, 1995.
 - [68] A. Constant and G. Henry and J.C. Charbonnier, *PYC éd., Principes de base des traitements thermiques thermomécaniques et thermochimiques des aciers*, Ivry sur Seine, 1992.
 - [69] J.H. Schmitt and V. Gorrec and H. Petitgand and P. Barges, note, IRSID MS 93.1172, 1993.
 - [70] N. Lambert and T. Greday, **Microstructure and deformation of high carbon wire**, Centre de Recherches Métallurgiques, Liège.
 - [71] N. Guelton, **Déformation de la perlite lamellaire**, IRSID MPM 98.1534, 1998.
 - [72] P. Leduc and M. Janacek and E. Decourcy and D. Bouleau and J. Languillaume and N. Guelton, **Influence de la microstructure de déformation par tréfilage sur la résistance en traction de la perlite**, IRSID MPM98.1929, 1998.
 - [73] J. Gil Sevillano and P. Van Houtte and E. Aernoudt, **Plastic anisotropy of pearlitic ferrite**, *Textures of Materials*, Proceedings of the 5th Int. Conf. on textures of materials (ICOTOM 5), 1978, Springer.
 - [74] H. Tashiro and H. Sato, **Effect of alloying elements on the drawability of eutectoid steel wires**, *NSC*, 1991, 55, 1232.
 - [75] J. Languillaume, **Microstructure d'un acier perlitique fortement déformé par tréfilage. Evolution avec les traitements thermiques et influence sur la résistance mécanique.**, INPG, 1995.
 - [76] M. Belassel, **Etude de la distribution des contraintes d'ordre I et II par diffraction des rayons X dans un acier perlitique**, ENSAM, 1994.
 - [77] M. Berveiller and A. Zaoui, **Modèles pour le polycristal non linéaire**, Ecole thématique du CNRS - Méthodes d'homogénéisation en mécanique des matériaux.
 - [78] H. Sabar, **Habilitation à diriger des recherches - Approche micromécanique du comportement des matériaux présentant des interfaces stationnaires ou mobiles**, Université de Metz, 1999.
 - [79] R. J. Asaro, **Crystal plasticity**, *Journal of Applied Mechanics*, 1983, 50, 921.

- [80] R. Hill and J.R. Rice, **Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain**, Journal of Mechanics and Physics of Solids, 1972, 20, 401.
- [81] R. Hill, **A general theory of uniqueness and stability in elastic-plastic solids**, Journal of Mechanics and Physics of Solids, 1958, 6, 236.
- [82] R. Hill, **Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip**, Journal of Mechanics and Physics of Solids, 1966, 14, 95.
- [83] R. Hill, **The essential structure of constitutive laws for metal composites and polycrystals**, Journal of Mechanics and Physics of Solids, 1967, 15, 79.
- [84] P. Franciosi, **Etude théorique et expérimentale du comportement élastoplastique des monocristaux métalliques se déformant par glissement : modélisation pour un chargement complexe quasi-statique**, Université Paris-Nord, 1984.
- [85] T. Iwakuma and S. Nemat-Nasser, **Finite elastic-plastic deformation of polycrystalline metals and composites**, Earthquake Research and Eng. Lab., 1983, 83-3-51.
- [86] P. Lipinski, **Habilitation à diriger des recherches - Modélisation du comportement des métaux en transformations élastoplastiques finies à partir des méthodes de transition d'échelles**, Université de Metz, 1993.
- [87] R. Hill, **Interfacial operators in composite media**, Journal of Mechanics and Physics of Solids, 1983, 31, 4, 347.
- [88] X. Sauvage, **Etude en sonde atomique et modélisation thermodynamique de l'évolution structurale d'aciers perlitiques fortement déformés**, Université de Rouen, 1997.
- [89] G. Géandier, **Caractérisation à la sonde tomographique du cuivre dans la micro-structure perlitique**, Université de Rouen, 1998.
- [90] D. Blavette and B. Deconihout and A. Bostel and J.M. Sarrau and M. Bouet and A. Menand, **The tomographic atom probe : A quantitative three-dimensional nanoanalytical instrument on an atomic scale**, Review of scientific instrument, 1993, 64, 10, 2911.
- [91] H. Petryk, **General conditions for uniqueness in materials with multiple mechanisms of inelastic deformation**, Journal of Mechanics and Physics of Solids, 2000, 48, 367.
- [92] F.A. Khalid and D.V. Edmonds, **On the properties and structure of micro-alloyed and copper-bearing hot-rolled steels**, Journal of Materials Processing Technology, 1997, 72, 434.
- [93] Le May and Krishnadev, I. Le May and L. McDonald Schetky, **Copper in Iron and Steel**, Wiley Interscience, 1990.
- [94] J. Agren, **A thermodynamic analysis of the Fe-C system**, Metallurgical Transactions A, 1979, 10, 1847.
- [95] P. Gustafson, **Fe-C-Cu**, Inst. Met. Res., 1990, 2549.
- [96] D. Bouleau, **Examens par MET de fils d'aciers perlitiques. Mesures du taux de substitution du cuivre dans la cémentite**, IRSID, 1997.
- [97] T. Iung and P. Maugis, **Précipitation du cuivre dans les aciers - Présentation et utilisation des résultats de G. Martin & al. (CEA)**, IRSID, 1997.
- [98] T. Mori and K. Tanaka, **Acta Metallurgica**, 1973, 21, 571.

-
- [99] R. Truesdell, eds. Huet, **Large strains**, Springer Verlag, 1954.
- [100] A. Paquin and S. Berbenni and V. Favier and X. Lemoine and M. Berveiller, **Micro-mechanical modelling of the elastic-viscoplastic behaviour of polycrystal steels**, International Journal of PLasticity, 2001, february.
- [101] G.E. Pellissier and M.F. Hawkes and W.A. Johnson and R.F. Mehl, **The interlamellar spacing of pearlite**, Transactions of the ASM, 1942, 1049, December.
- [102] S.A. Saltykov, 2nd ed, **Stereometric metallography**, Metallurgizdat, 1958, Moscow.
- [103] X. Sauvage, **Etude de la dissolution de la cémentite lors du tréfilage de la perlite**, GMP Université de Rouen, 2001.
- [104] P. Zattarin, **Couplage du modèle auto-cohérent du polycristal à un code d'éléments finis**, LPMM Université de Metz, 1999.
- [105] R. Krummeich and H. Sabar and M. Berveiller, **Micromechanical approach of lamellar nano-composite : influence of the microstructure on the yield strength**, Trans. of the ASME, 2001, 123, 216-220.
- [106] E. Kroner, Zur plastischen Verformung des Vielkristalls, Acta Metall., 9, 155, 1961.
- [107] F. Sidoroff, **Loi de comportement en transformation finie**, cours de l'Ecole Centrale de Lyon.

Annexes

A

Formulation invariante de l'énergie complémentaire

Si un matériau présente une anisotropie de comportement ou microstructure il paraît intéressant de déterminer les formes invariantes de l'énergie[28] vérifiant les symétries du solide et le principe d'isotropie de l'espace. Cette théorie permet d'effectuer le calcul de $\psi(\Sigma, \kappa, \rho)$ dans l'approche présentée. L'anisotropie du problème de l'inclusion ellipsoïdale d'Eshelby correspond à la propriété d'orthotropie si l'anisotropie élastique du matériau peut être négligée.

Un matériau orthotrope présente trois directions privilégiées ($\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$) et le groupe d'invariance S du solide considéré est l'ensemble $\{\pm \mathbf{I}, \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3\}$ où $\mathbf{R}_i$ est la réflexion par rapport au plan de base de normale $\mathbf{e}_i$ dans la configuration actuelle. Il est nécessaire d'introduire les tenseurs de structure $\mathbf{M}_i$ définis par $\mathbf{M}_i = \mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_i$, $i=1,2,3$ ²⁵. La représentation d'une fonction à valeur scalaire, appelée invariant par rapport à un groupe de symétrie S du matériau est une combinaison polynômiale sur une base d'invariants scalaires appelée base d'intégrité ($I_1, I_2, \dots, I_n$) qui définit un système libre $(I_k(\epsilon^p, \mathbf{M}_i)_{i=1,2,3})_{k=1,\dots,n}$, d'où l'expression :

$$\psi^*(\epsilon^p, \mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2, \mathbf{M}_3) = \sum_{i=1}^n \alpha_i P_i[I_k(\epsilon^p, \mathbf{M}_i)] \quad (\text{A.1})$$

Dans l'équation (A.1), les variables sont ϵ_{ij}^p , variables pilotes, et les tenseurs de structures $\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2, \mathbf{M}_3$. La base d'intégrité donnée par Boehler[28] est :

$$\{Tr(\mathbf{M}_1 : \epsilon^p), Tr(\mathbf{M}_2 : \epsilon^p), Tr(\mathbf{M}_3 : \epsilon^p), Tr(\mathbf{M}_1 : \epsilon^{p^2}), \\ Tr(\mathbf{M}_2 : \epsilon^{p^2}), Tr(\mathbf{M}_3 : \epsilon^{p^2}), Tr(\epsilon^{p^3})\}$$

La fonction $\psi^*(\epsilon^p, \kappa, \rho)$ considérée est quadratique en ϵ^p , donc sa représentation invariante est un polynôme de degré 2 de la base précédemment citée :

$$\begin{aligned} \psi^*(\epsilon^p, \mathbf{M}_i) &= \alpha_1 Tr(\mathbf{M}_1 : \epsilon^{p^2}) + \alpha_2 Tr(\mathbf{M}_2 : \epsilon^{p^2}) \\ &+ \alpha_3 Tr(\mathbf{M}_3 : \epsilon^{p^2}) + \alpha_4 Tr(\mathbf{M}_1 : \epsilon^p) Tr(\mathbf{M}_2 : \epsilon^p) \\ &+ \alpha_5 Tr(\mathbf{M}_1 : \epsilon_p) Tr(\mathbf{M}_3 : \epsilon_p) + \alpha_6 Tr(\mathbf{M}_2 : \epsilon^p) Tr(\mathbf{M}_3 : \epsilon^p) \\ &+ \alpha_7 (Tr(\mathbf{M}_1 : \epsilon^p))^2 + \alpha_8 (Tr(\mathbf{M}_2 : \epsilon^p))^2 + \alpha_9 (Tr(\mathbf{M}_3 : \epsilon^p))^2 \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

²⁵Comme $\mathbf{M}_i$ est un invariant de S , il est aisé de déduire que ψ^* est isotrope par rapport à $(\epsilon^p, \mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2, \mathbf{M}_3)$ et orthotrope par rapport ϵ^p

En identifiant (A.2) à l'expression (14.10), à l'aide de (15.1), on obtient aisément les coefficients α_i .

B

Evolution de la structure cristalline

On repère l'orientation du réseau par trois angles, communément nommés angles d'Euler. Le premier ψ est la précession, ϕ la rotation propre et θ la nutation. Si le comportement est élastique, la vitesse de rotation du réseau w^* est conditionnée par la rotation totale w . Si il y a de l'activité plastique, l'équation à utiliser est (19.3) : la vitesse de rotation du réseau est alors fonction, non seulement du glissement sur les systèmes actifs, mais aussi de l'activation successive des systèmes.

On étudie ici le cas du laminage et de la traction de la ferrite. Les figures de pôles inverse sont obtenues pour les simulations réalisées. Dans le cas du laminage, on représente les figures de pôles inverses dans les directions de laminage, transverse et normale, dans le cas de la traction, seule la direction de traction est représentée.

On observe, dans le cas du laminage, une évolution nette des orientations des grains. Dans la direction de laminage, après 30% de réduction, la plus grande population de grains prennent une orientation dans une région intermédiaire, proche de la direction $\{111\}$. Dans les directions transverses et normales à la direction de laminage, on observe une tendance des grains à s'orienter vers la direction (100) .

Dans le cas de la traction, on observe une tendance générale des orientations à s'accumuler progressivement vers la direction de traction $\{100\}$.

Les figures de pôles calculées servent d'indicateur de l'évolution de la texture de déformation. Il serait préférable de travailler avec un grand nombre de grains (> 1000), mais l'objectif ici n'est pas de modéliser un polycristal de ferrite, mais bien le composite lamellaire.

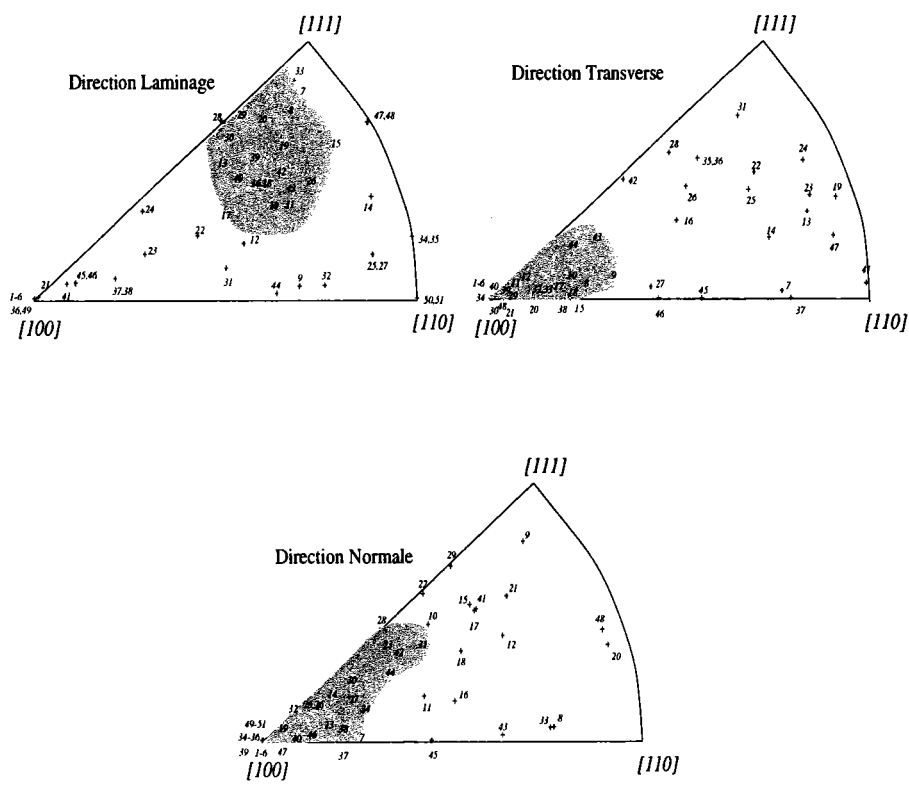


FIG. B.1 – Répartition des orientations selon la représentation de la figure de pôle inverse après 30% de réduction dans la direction normale au plan de laminage.

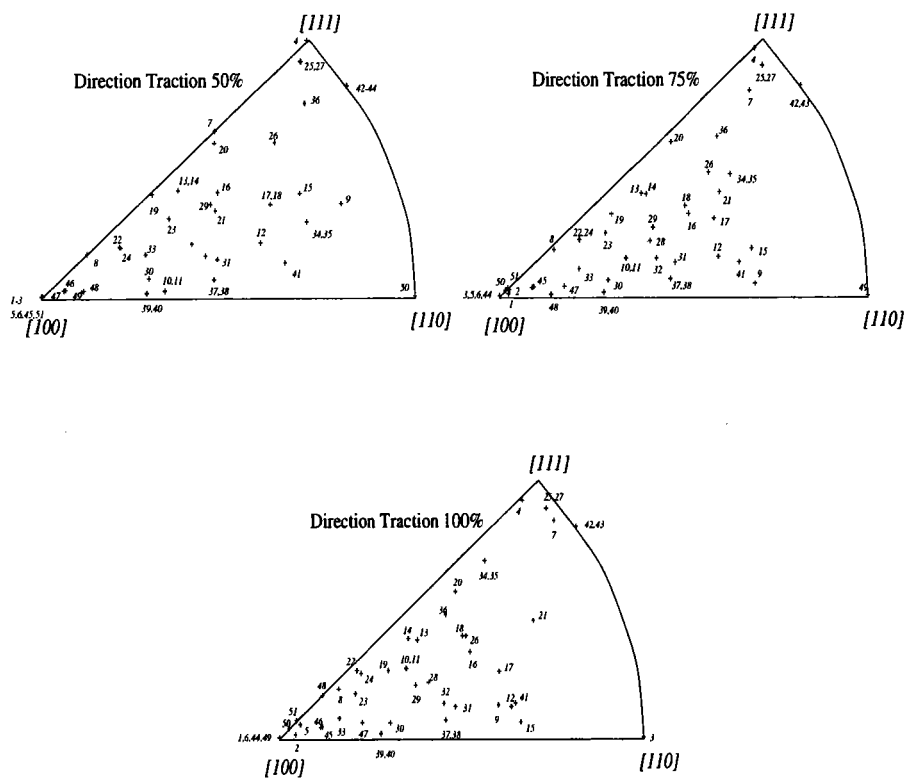


FIG. B.2 – Répartition des orientations selon la représentation de la figure de pôle inverse après 50%, 75%, et 100% d'élongation dans la direction de traction.

C

Activité des systèmes de glissement

L'évolution de l'orientation du cristal est fonction du glissement plastique généré lors du chargement. Il est caractérisé par la cission résolue critique τ_c^g , fonction du glissement plastique cumulé γ^g sur les différents systèmes actifs, et de leur interactions.

Dans le modèle présenté, il n'y a pas d'évolution de la matrice d'écrouissage avec la densité de dislocations. On se place dans un cas très simple d'interactions constantes des systèmes de glissement (interaction forte ou faible).

Cas de la ferrite

Dans le cas de la traction en général (voir figure C.1), le nombre moyen de systèmes actifs (5) est plus élevé qu'en laminage (4). La répartition du glissement peut être très homogène (cas des grains $n^\circ 1, 49$ par exemple en laminage, et $n^\circ 37, 42$ et 49 en traction), ou hétérogène (dans le cas du laminage des grains $n^\circ 27$ et 42 , la plus grande partie du glissement plastique est confinée à un système (respectivement $1d$ et $5b$)).

On observe sur les courbes présentée, une 'évolution verticale' de la cission critique pour certains systèmes (par exemple en traction, figure C.1, grain $n^\circ 10$, systèmes $6d, 5c, 2a$). Il s'agit là d'une désactivation de système de glissement au cours de l'histoire de la déformation (durcissement latent sans glissement). D'ailleurs, d'autres systèmes s'activent tardivement à une valeur initiale de la cission critique plus élevée, correspondant effectivement à l'écrouissage latent précédent l'activation du système retardataire (cas du grain $n^\circ 1$, systèmes $4d, 1c, 1d$).

On comprend ici que la prise en compte de la rotation du réseau cristallin rend les systèmes de glissement plus ou moins favorables (susceptible de s'activer) au cours de la déformation. Si certains systèmes actifs dès le début de la déformation deviennent défavorables lors de l'accommodation par rotation du réseau, ils sont relayés par l'activation de systèmes plus favorables à cette histoire donnée du monocristal.

Cas de la cémentite

Idem que dans le cas de la ferrite. Par exemple, dans le cas de la traction, l'activité plastique est donnée figure C.4.

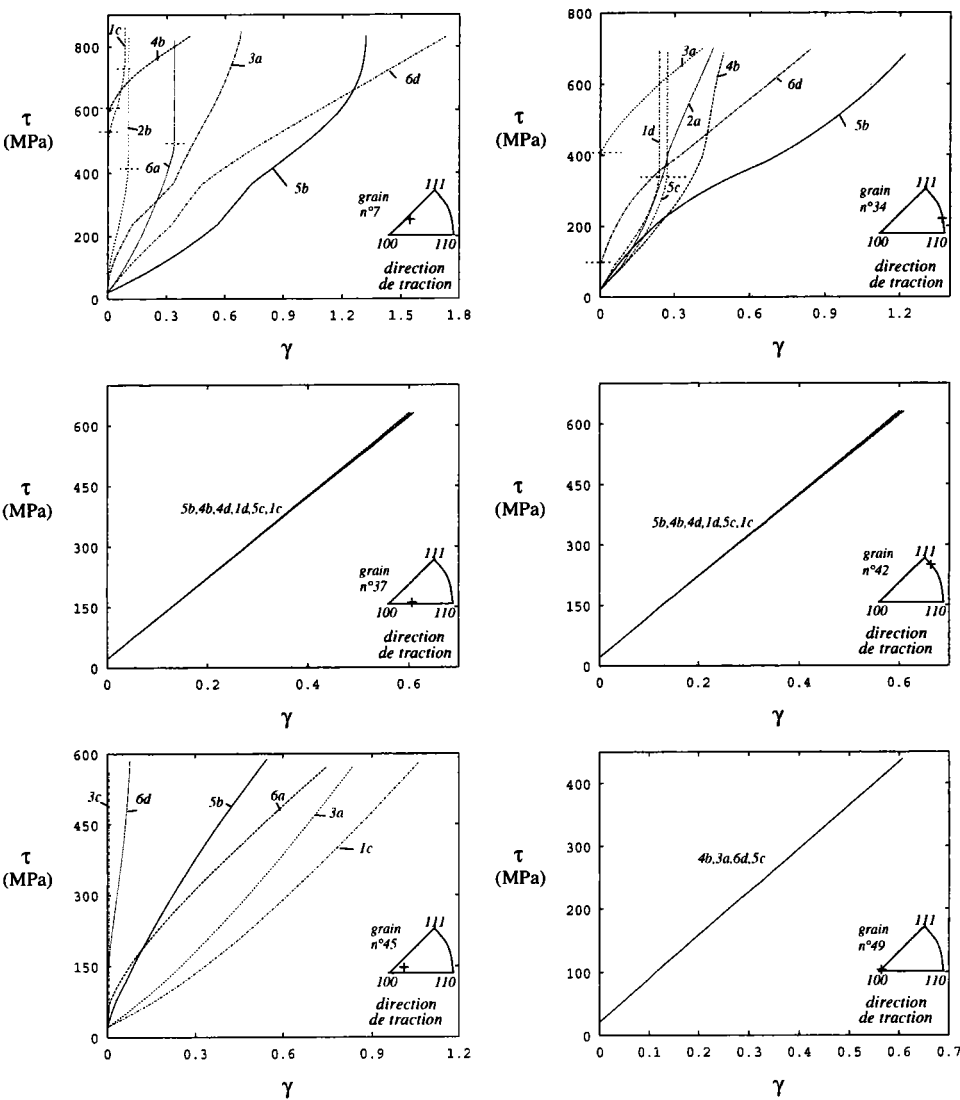


FIG. C.1 – Répartition du glissement plastique local pour un grain de ferrite orienté selon la représentation de la figure de pôle inverse après élongation dans la direction de traction.

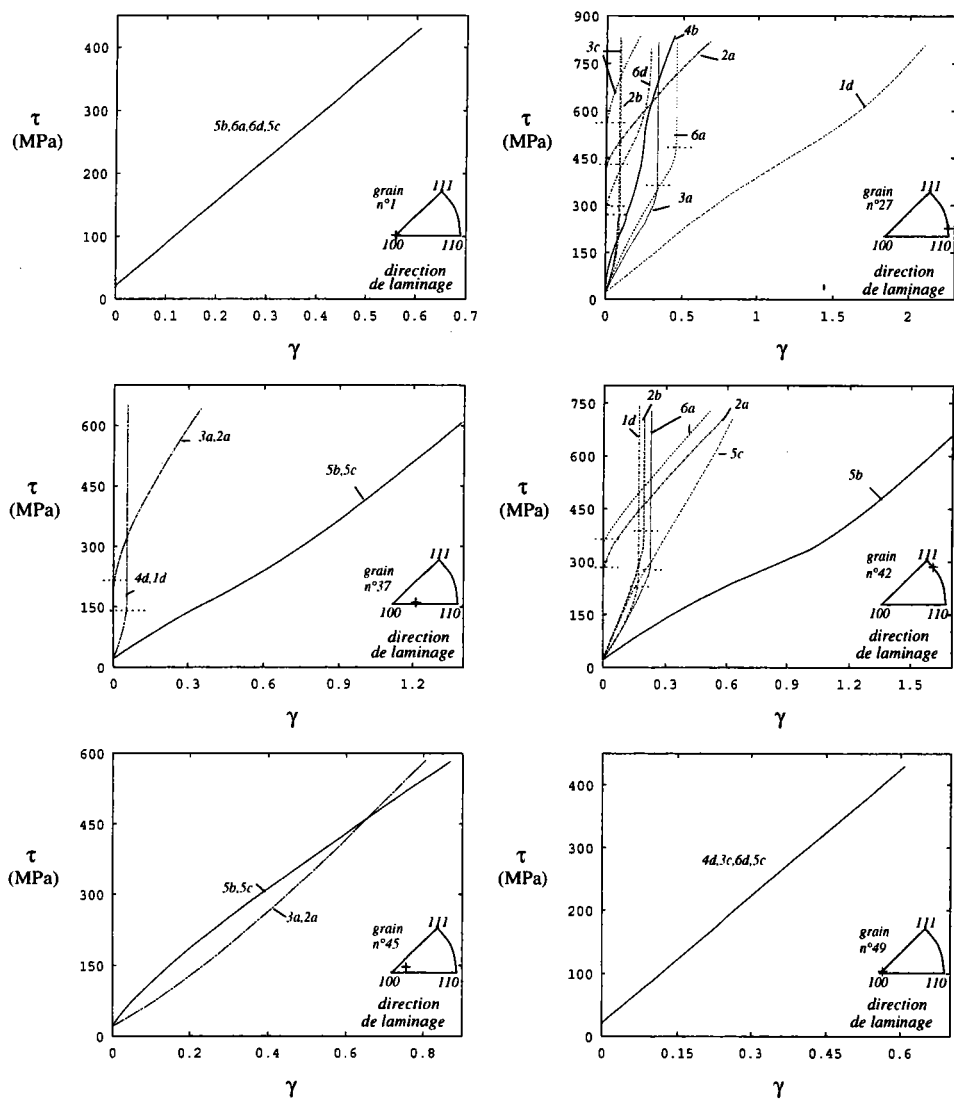


FIG. C.2 – Répartition du glissement plastique local pour un grain de ferrite orienté selon la représentation de la figure de pôle inverse après laminage.

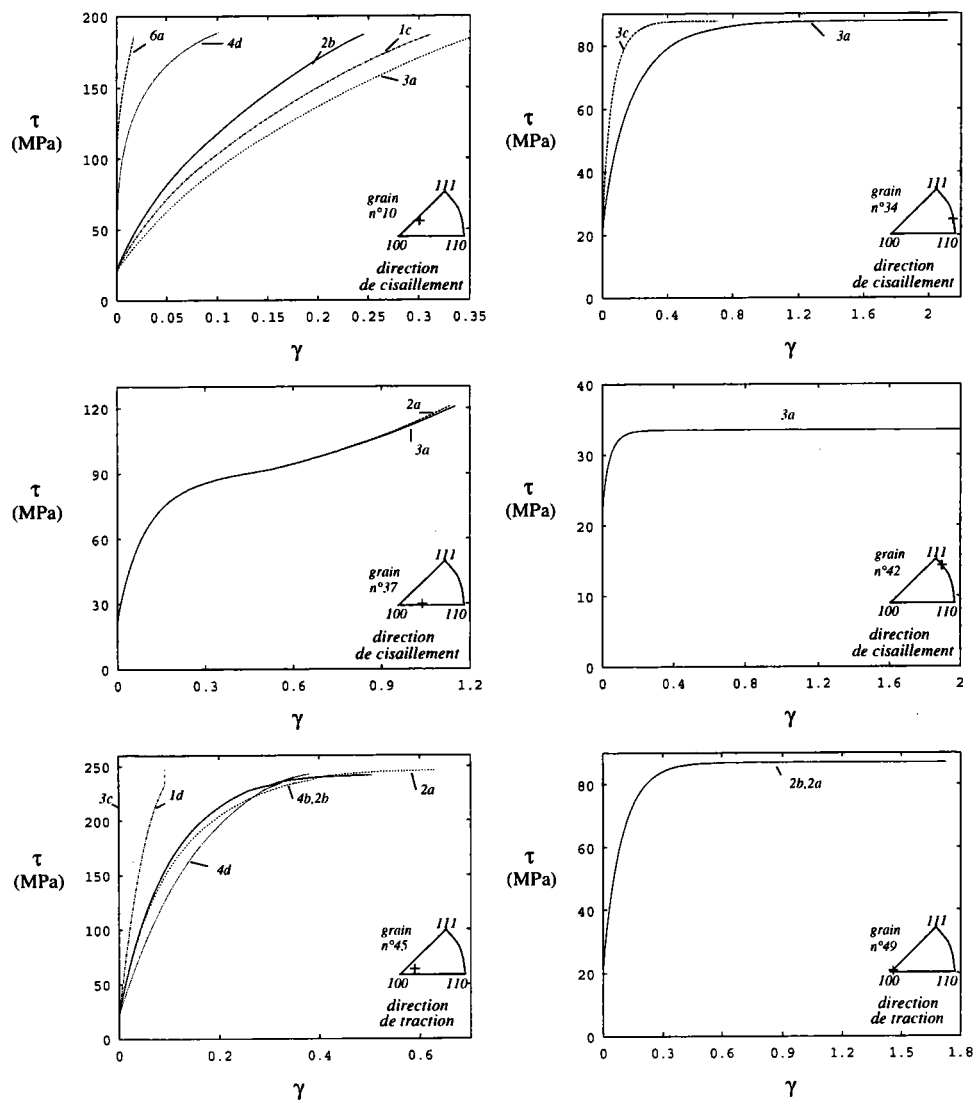


FIG. C.3 – Répartition du glissement plastique local pour un grain de ferrite orienté selon la représentation de la figure de pôle inverse après cisaillement.

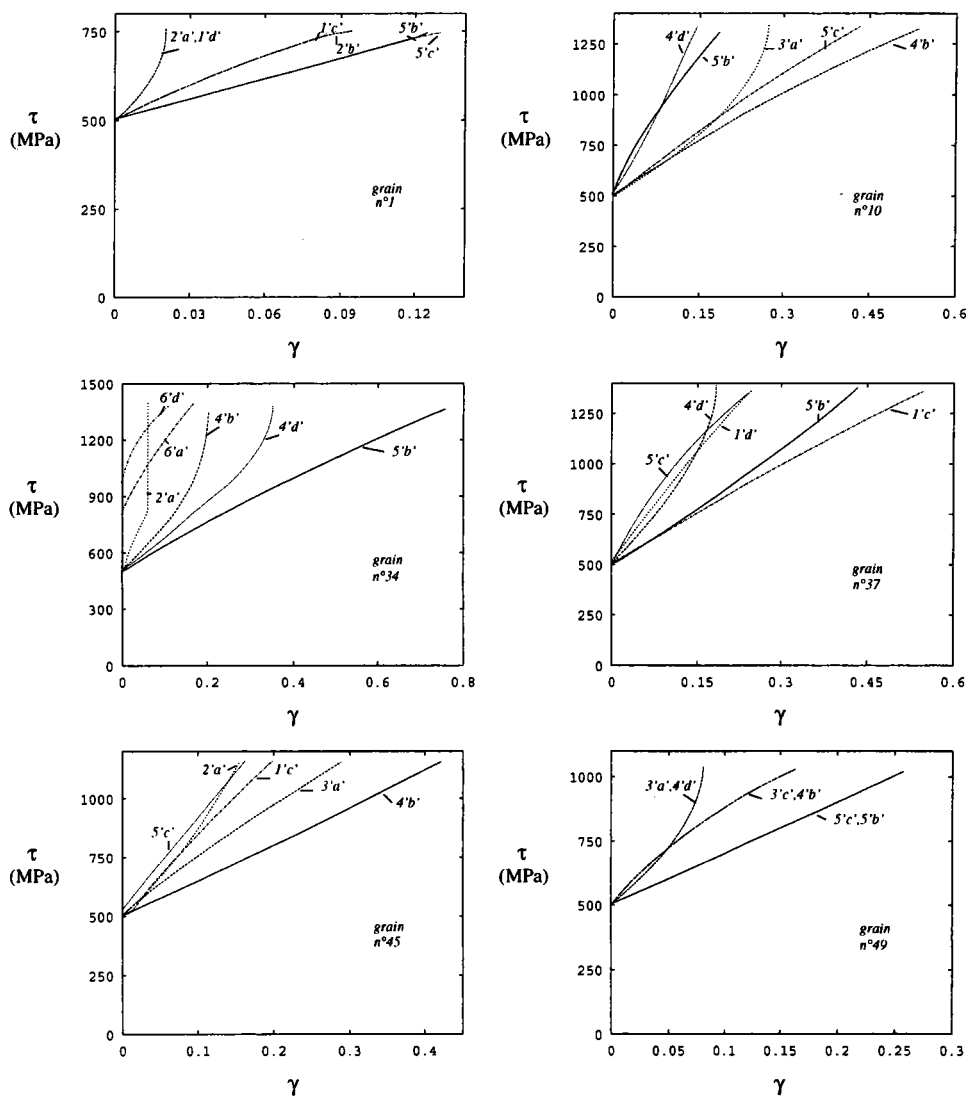


FIG. C.4 – Répartition du glissement plastique local pour un grain de cémentite après traction.

D

Pertinence de l'extension au problème élastoplastique de la borne de Hashin-Strikman

Pour estimer la pertinence du tenseur des modules équivalents choisi, nous faisons appel à la formulation variationnelle de Hashin et Shtrikman. Introduisons la fonctionnelle de Hashin et Shtrikman pour un état quelconque du gradient des vitesses $\boldsymbol{\eta}$, $HS^o(\boldsymbol{\eta})$, qui n'est autre que l'énergie potentielle macroscopique associée au tenseur des modules équivalent de Hashin et Shtrikman :

$$2HS^o(\boldsymbol{\eta}) = \mathbf{G} : \mathbf{f}^{HS} : \mathbf{G}$$

dans le cas biphasé étudié.

En utilisant la définition des modules effectifs $\tilde{\mathbf{f}}$, on peut montrer :

$$\forall \boldsymbol{\eta}, \quad HS^o(\boldsymbol{\eta}) - \Delta\Psi(\boldsymbol{\eta}) \leq \mathbf{G} : \tilde{\mathbf{f}} : \mathbf{G} \leq HS^o(\boldsymbol{\eta}) + \Delta\Phi(\boldsymbol{\eta}) \quad (\text{D.1})$$

avec

$$2\Delta\Phi(\boldsymbol{\eta}) = \langle (\mathbf{g} - \boldsymbol{\eta}) : (\mathbf{f} - \mathbf{f}^o) : (\mathbf{G} + \mathbf{g} - \boldsymbol{\eta}) \rangle$$

et

$$2\Delta\Psi(\boldsymbol{\eta}) = \langle (\mathbf{g} - \boldsymbol{\eta}) : \mathbf{f}^o : (\mathbf{S} - \mathbf{S}^o : \mathbf{f}^o : (\mathbf{g} - \boldsymbol{\eta})) \rangle$$

qui sont des termes quadratiques supplémentaires. On voit bien ici que l'optimisation de la solution passe par l'annulation des deux termes quadratiques $\Delta\Phi(\boldsymbol{\eta}(\text{ou}\mathcal{T}))$ et $\Delta\Psi(\boldsymbol{\eta}(\text{ou}\mathcal{T}))$. Si donc on choisit la polarisation optimale $\mathcal{T}^o$, on peut montrer que les tenseurs de Hashin et Shtrikman constituent les meilleures estimations des modules effectifs que l'on puisse construire avec des champs de polarisation homogènes par phases. En effet, comme $\boldsymbol{\eta} = \delta\mathbf{f}^{-1} : \mathcal{T}$, et si on utilise $\mathcal{T}^o = \delta\mathbf{f}^o : \mathbf{g}^o$, alors $\Delta\Phi(\mathcal{T}) = 0$ et $\Delta\Psi(\mathcal{T}) = 0$. Notre objectif étant l'estimation des propriétés mécaniques du grain de perlite, nous nous satisferons de l'approximation de Hashin et Shtrikman, qui résoud de façon exacte le problème d'homogénéisation. Le milieu de référence peut alors être choisi quelconque, suffisamment éloigné des propriétés des constituants. Nous choisirons donc pour $\mathbf{f}^o$, le milieu élastique isotrope ayant les même propriétés élastiques que celles des constituants.