

Rôle de la microstructure polycristalline à différentes échelles sur les premiers stades d'endommagement en fatigue: expériences et simulations en plasticité cristalline.

L. Signor^a, P. Villechaise^a

a. Institut Pprime (UPR3346) CNRS - ISAE ENSMA - Univ. Poitiers, loic.signor@ensma.fr

Résumé

Cet exposé porte sur l'étude des configurations cristallographiques locales favorisant la formation de microfissures de fatigue dans les alliages métalliques polycristallins. Les travaux présentés combinent des études expérimentales - incluant caractérisation microstructurale et analyse des modes de déformation et d'endommagement (EBSD, MEB) - et des simulations en élasto-plasticité cristalline par la méthode des éléments-finis. Cette démarche est illustrée par deux études consacrées à l'amorçage de fissures transgranulaires au sein d'un acier austénitique 316LN puis d'un alliage de titane TA6V présentant des régions microtexturées.

Mots clés : Amorçage de micro-fissures de fatigue; Calcul de microstructures ; Agrégat polycristallin; Elastoplasticité cristalline

1. Introduction

La formation de micro-fissures de fatigue au sein des matériaux métalliques polycristallins est étroitement liée à la micro-plasticité à l'échelle des grains se développant sous la forme de bandes de glissement persistantes (BGP). En absence de défauts de type inclusions ou porosités, l'amorçage est observé en surface. En effet, le relief induit par l'émergence des BGP en surface (composé d'extrusions et d'intrusions) constitue un site d'amorçage transgranulaire privilégié [1]. L'amorçage, observé également aux joints de grains et de macles, peut alors être lié à l'interaction des BGP aux joints. La température, l'environnement et de l'état de surface ont un rôle important dans ces processus qui ne sera pas discuté ici. La compréhension et la modélisation de la formation des BGP, de leur cinétique (évolution du relief induit) et de leur rôle sur la formation de micro-fissures restent à ce jour des problèmes encore largement ouverts (cf. exposé de M. Sauzay). L'étude de l'amorçage nécessite d'accéder aux champs mécaniques locaux - en particulier le glissement plastique - hétérogènes au sein du polycristal en raison de l'anisotropie du comportement élastique et plastique du cristal. Les calculs de microstructures en champs complets en fatigue [2], basés sur l'utilisation de lois de comportement de type élasto-(visco-)plasticité cristalline et résolus le plus souvent par la méthode des éléments finis, ont ainsi connu un essor important rendu possible par l'augmentation des capacités de simulations. Les travaux présentés dans la suite visent à illustrer comment l'utilisation d'une telle approche permet (i) d'identifier les configurations cristallographiques locales favorisant la micro-plasticité et sa transition possible vers la formation de fissures mais aussi (ii) de fournir des indications sur les paramètres microstructuraux et les forces motrices gouvernant l'amorçage.

2. Acier inoxydable austénitique de type 316LN

Les résultats reportés dans cette partie portent sur l'amorçage des microfissures au sein d'un acier inoxydable austénitique 316LN en fatigue oligocyclique [3] (traction / compression symétrique sous air, température ambiante, amplitude de déformation plastique de 0.2% imposée). L'observation par microscopie électronique à balayage (MEB) après 5000 cycles (soit 20% de la durée de vie) d'une région de 1030 grains en surface de l'éprouvette a permis de détecter 143 fissures (soit une densité de 110 fissures/mm²). La majeure partie des fissures (66%) est de type transgranulaire, associé à un amorçage le long d'une BGP (Fig. 1.a). L'amorçage des autres fissures est observé équitablement aux joints de grains et de macles. L'analyse qui suit porte uniquement sur l'amorçage transgranulaire. Celui-ci est observé préférentiellement dans les gros grains: la taille moyenne des grains présentant une fissure est de 58μm alors que celle des autres grains est de 32μm. En comparant la trace de la fissure en surface avec celles des 4 plans de glissement {111} dans le cas des métaux cubiques à faces centrées (CFC) - calculées à l'aide de l'orientation cristalline mesurée par la technique de diffraction des électrons rétrodiffusés (EBSD) - on identifie le plan de glissement activé dans la bande ayant conduit à la fissure. Parmi les 3 directions de glissement $\langle 110 \rangle$ associées à ce plan, on suppose que le système activé est celui qui présente le plus fort facteur de Schmid. Le facteur de Schmid des systèmes activés et donnant lieu aux fissures est distribué presque uniformément entre 0.35 et 0.5 ce qui signifie que les grains fissurés ne présentent pas d'orientation cristallographique préférentielle par rapport à l'axe de traction. En revanche, les distributions des angles λ et β , décrivant l'orientation du système de glissement actif par rapport à la surface, occupent des plages de valeurs privilégiées dans le cas des grains fissurés (Fig. 1.b et c) qui peuvent être reliées à la capacité de la bande à former un relief en surface.

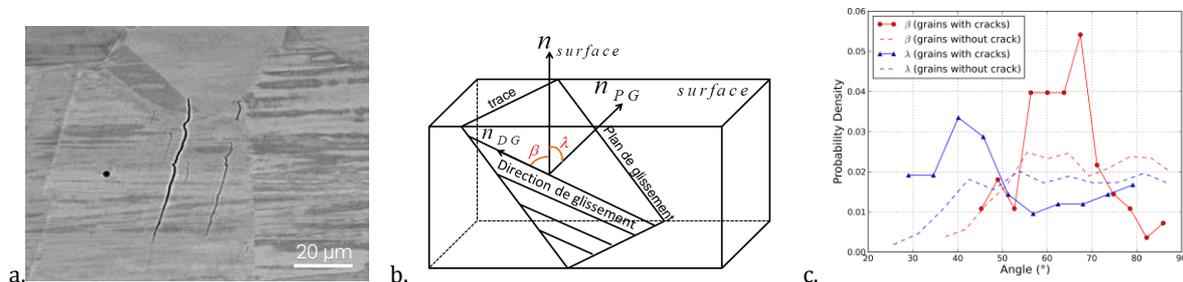


Figure 1. (a) Fissures transgranulaires amorcées en surface le long de BGPs, (b) définition des angles λ et β , (c) distributions des angles λ et β obtenues dans les grains présentant ou pas une fissure.

Les différents paramètres étudiés ici ne permettent pas de définir un indicateur prédictif des sites d'amorçage. La connaissance des champs mécaniques locaux, en particulier le glissement plastique, est donc indispensable. Ceux-ci ont été évalués par des simulations numériques en champs complets réalisées avec une description réaliste de la microstructure, caractérisée en 3D au voisinage d'une fissure par coupes sériées et EBSD permettant de définir un maillage régulier d'un agrégat polycristallin constitué de 386 grains (Fig. 2). Les simulations ont été réalisées avec une loi de comportement élasto-visco-plastique cristalline tenant compte de l'élasticité cubique, des 12 systèmes de glissement et d'un écrouissage isotrope de type multiplicatif décrit en fonction des densités de dislocations. La réponse élastoplastique de l'agrégat non-fissuré a été simulée durant 2 cycles. L'analyse des contraintes et déformations axiales par grains (Fig. 3.a) illustre la très forte hétérogénéité inter- et intra-granulaire, résultant principalement de l'anisotropie élastique [4]. L'activité de glissement plastique la plus intense est effectivement prédite dans le grain fissuré (Fig. 3.b), indiquant le rôle important joué par le glissement plastique cumulé sur un système comme

moteur de l'amorçage. Ce résultat souligne également l'importance de la description 3D réelle de la microstructure afin de simuler de façon pertinente les champs locaux.

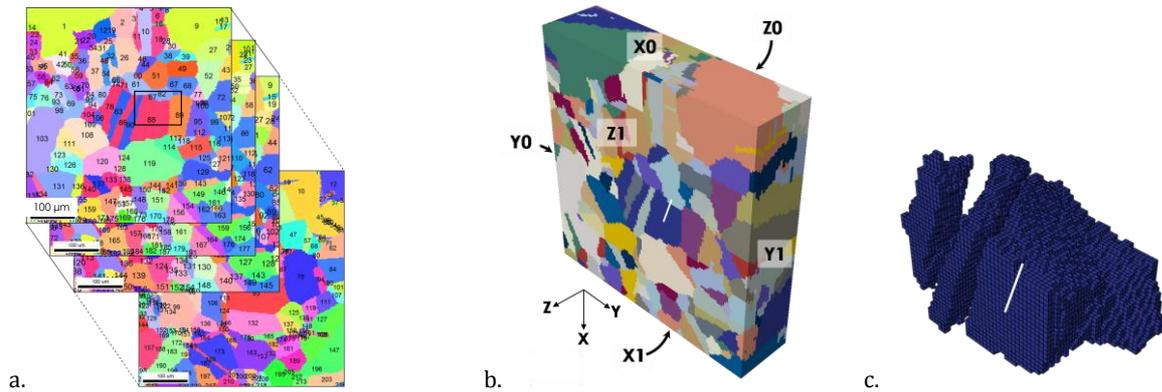


Figure 2. (a) Stack de cartes EBSD de l'agrégat reconstruit (sur la 1ère carte en surface, le rectangle délimite l'image MEB de la Fig. 1.a); (b) agrégat reconstruit et (c) maillage du grain dans lequel des fissures ont été observées (le trait blanc indique la position de la plus grande fissure).

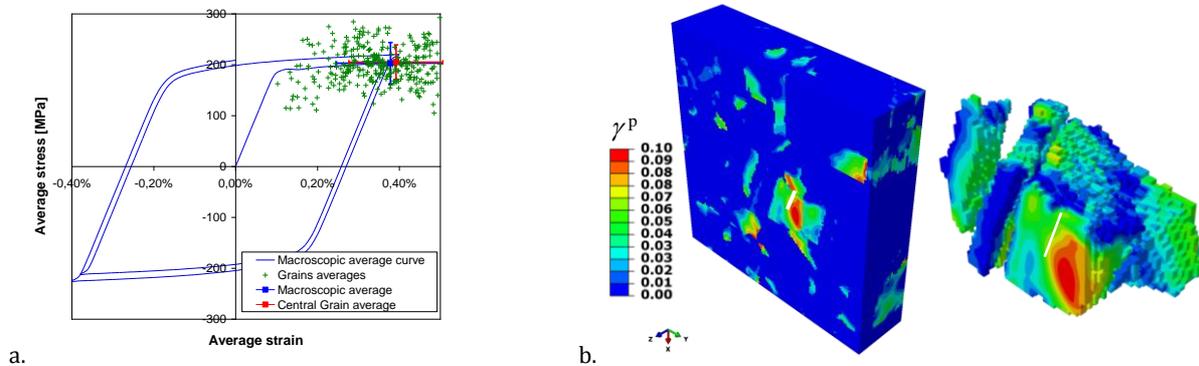


Figure 3. (a) Comportement macroscopique de l'agrégat avec les contraintes et déformations axiales moyennes par grains (points verts), l'écart-type associé est indiqué par des barres d'erreur pour le grain fissuré seulement (rouge) et l'agrégat entier (bleu); (b) Glissement plastique cumulé sur le système de glissement C1 après 2 cycles au sein de l'agrégat et dans le grain fissuré.

On notera toutefois que, localement, le glissement plastique maximal simulé n'est pas atteint précisément au niveau de la plus grande fissure. Des investigations supplémentaires (étude d'autres configurations de grains fissurés, nombre de cycles simulés plus élevé, meilleure description du comportement cyclique) sont nécessaires afin d'évaluer la capacité à prévoir plus finement les lieux d'amorçage.

3. Alliage de titane TA6V

On s'intéresse dans cette partie à un alliage TA6V forgé à microstructure bimodale, i.e. constitué de nodules de phase α hexagonale compacte (HC) et de colonies de lamelles α dans une faible fraction ($\sim 5\%$ en volume) de matrice β cubique centrée. De par la haute résistance et la faible capacité d'érouissage de ce type d'alliage, la majeure partie de la durée de vie en fatigue correspond à l'amorçage de quelques fissures. L'analyse des modes de déformation et d'endommagement locaux [5] a révélé que l'activation du glissement plastique se produit au sein des nodules α principalement suivant les plans de base ou prismatiques. L'amorçage est observé en surface au sein de quelques nodules le long de bandes de glissement sur ces 2 types de systèmes de glissement. La fissure fatale a pour origine un amorçage sur un plan basal, caractérisé par la formation de facette plane associée

à un mécanisme qualifié de "pseudo-clivage". L'orientation cristalline des nodules contenant une fissure amorcée sur un plan basal occupe un domaine spécifique du triangle standard (Fig. 4.a) globalement compris entre le pôle noté [BOb] (facteur de Schmid maximal) et le pôle [0001] (axe de traction perpendiculaire au plan basal, module d'Young maximal, Fig. 4.b). Ces constats expérimentaux suggèrent que ce mode d'amorçage est gouverné par le glissement plastique et par la contrainte normale au plan basal. Par ailleurs, les fissures fatales sont en général formées au sein de régions microtexturées, appelées macrozones, associées à une orientation proche du pôle [0001] (cf. zone 1 contenant majoritairement des orientations représentées en rouge dans une carte EBSD, Fig. 4.c) dont la présence conduit à un abattement de la durée de vie. Plus généralement, la nature et la répartition des macrozones ont également une influence sur la dispersion des durées de vie. L'orientation spécifique des sites d'amorçage et l'influence des macrozones suggèrent un rôle de l'élasticité cristalline (Fig 4.b), conduisant à une hétérogénéité des champs de contraintes à 2 échelles (échelle d'un grain avec ces premiers voisins et échelle des macrozones).

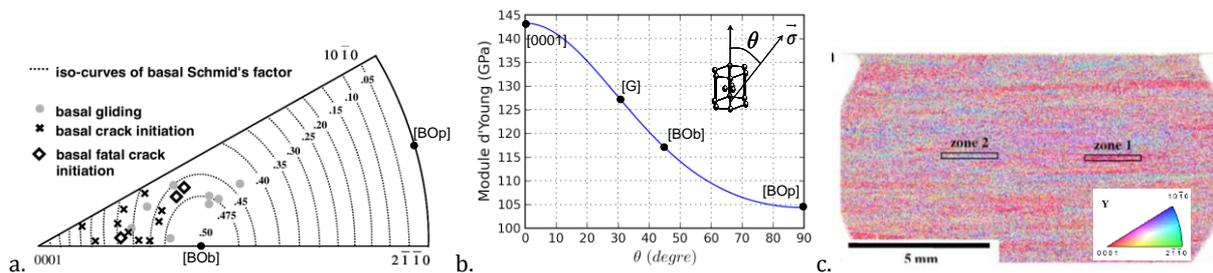


Figure 4. (a) Orientation des nodules présentant des traces de glissement ou des fissures associés aux plans de base (figure de pôles inverse de l'axe de traction avec iso-valeur du facteur de Schmid sur le système basal); (b) Module d'Young du monocristal hexagonal en fonction de l'angle θ entre l'axe de traction et la normale au plan basal; (c) Large carte EBSD mettant en évidence des macrozones.

Afin de mieux comprendre et quantifier ces résultats, une démarche de simulation, similaire à celle définie dans [4] dans le cas des CFC, a été mise en oeuvre pour les polycristaux HC [6] afin d'y évaluer la distribution des contraintes élastiques dans les grains par famille d'orientation cristalline. Celle-ci est basée sur de multiples réalisations d'agrégats polycristallins pour lesquels la même orientation cristalline est assignée au grain central en surface (Fig. 5.a). Pour chaque orientation étudiée et assignée au grain central, 140 agrégats de morphologie identique sont générés en tirant aléatoirement l'orientation des grains restants de façon à reproduire la texture cristallographique visée. Chaque grain a un comportement élastique linéaire isotrope transverse. Les conditions aux limites appliquées sont telles que l'agrégat est macroscopiquement en traction uniaxiale, le grain central appartenant à une surface libre de charge. On reporte ici les résultats relatifs à 3 orientations parmi celles étudiées (Figs. 4 et 5): les orientations notées [BOb] et [BOp] désignent des grains bien orientés pour le glissement basal et prismatique respectivement (facteur de Schmid égal à 0.5), tandis que l'orientation [G] a été définie au coeur du domaine favorable à l'amorçage des fissures suivant un plan de base. La Fig. 5.b illustre la fluctuation de la contrainte axiale subie par 140 grains centraux d'orientation [BOb] au sein d'un polycristal non-texturé pour une contrainte axiale macroscopique unitaire. Cette fluctuation possède une contribution intra-granulaire (variation de la contrainte locale au sein d'un grain représentée par une barre d'erreur égal à l'écart-type) et une contribution inter-granulaire (variation de la contrainte moyenne d'un grain à un autre). Dans l'exemple considéré, l'étendue de la contrainte axiale moyenne par grain représente environ 15% de la contrainte macroscopique. La Fig. 5.c indique la distribution de la cission résolue τ locale (valeur au point d'intégration). La moyenne $\langle \tau \rangle$ obtenue pour les 140 réalisations (Tab. 1) correspond alors au facteur de Schmid effectif introduit par [4]. La distribution des cissions résulte de l'hétérogénéité des

contraintes due à l'anisotropie élastique, combinée à l'anisotropie plastique relative à l'orientation des différents systèmes de glissement. Par exemple, les nodules d'orientation [BOp], présentant le module d'Young le plus faible, subissent en moyenne une contrainte axiale inférieure à la contrainte macroscopique expliquant que le facteur de Schmid effectif est inférieur au facteur de Schmid "conventionnel" égal à 0.5. De telles données peuvent servir à prévoir de façon probabiliste l'activation du glissement en surface des polycristaux, ce qui constitue une des informations importantes pour comprendre la dispersion des durées d'amorçage.

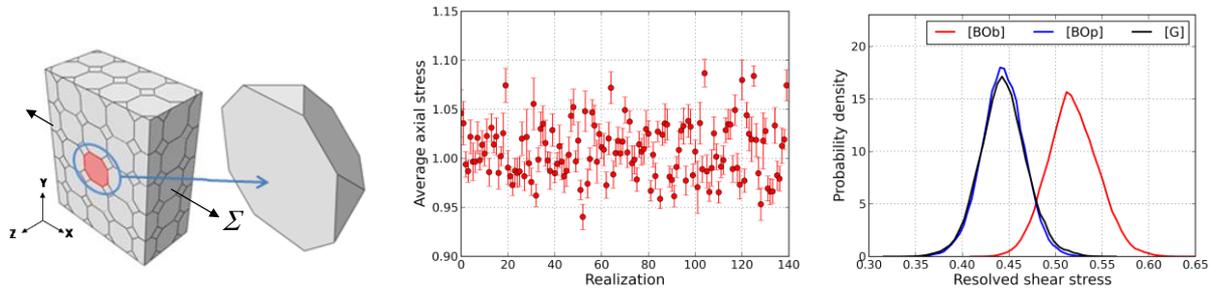


Figure 5. (a) Agrégat utilisé et grain central; (b) Moyenne et écart-type de la contrainte axiale σ_{xx} d'un grain central [BOb] en fonction de la réalisation; (c) Distribution de la cission résolue locale τ au sein des 140 grains centraux pour les 3 orientations étudiées (résultats obtenus dans le cas d'un polycristal sans texture cristallographique subissant une contrainte axiale macroscopique Σ unitaire).

Orientation	$\langle \sigma_{xx} \rangle$	$\langle \tau \rangle$	$\langle I \rangle$
[BOb]	1,007	0,519	0,788
[BOp]	0,983	0,443	0,682
[G]	1,040	0,444	0,790

Table 1. Moyennes de la contrainte axiale σ_{xx} , de la cission réduite τ et de l'indicateur d'amorçage I au sein des 140 grains centraux pour les 3 orientations étudiées (polycristal non-texturé, Σ unitaire).

Un indicateur d'amorçage $I = \tau (1+m \sigma)$ a été défini de façon à prendre en compte la cission résolue τ et la contrainte normale au plan de glissement σ . Cette quantité se rapproche des indicateurs de fatigue de type Fatemi-Socie [2] dans lequel le glissement plastique est remplacé par la cission résolue. Le coefficient m de sensibilité à la contrainte normale a été fixé à 1. En moyenne, l'indicateur maximal est obtenu pour l'orientation [G], très légèrement supérieur à la valeur obtenue pour l'orientation [BOb]. Ce type d'indicateur est donc cohérent, au moins qualitativement, avec les domaines d'orientations favorables à l'amorçage identifiés expérimentalement. Une définition plus fine et quantitative de ces domaines nécessite d'étendre les statistiques de champs à un nombre plus important d'orientations étudiées.

La prise en compte de la présence de macrozones, caractérisées par une forte texture cristallographique à une échelle intermédiaire comprise entre celle des grains et celle de l'échantillon, a été réalisée de la façon suivante pour 2 types de macrozones, notées M1 et M2, représentatives respectivement des zones 1 et 2 décrites sur la Fig. 4.c. Les orientations cristallines assignées aux grains du polycristal (à l'exception du grain central) sont tirées aléatoirement de façon à représenter la texture de ces 2 zones. De plus, les conditions aux limites appliquées à l'agrégat sont telles que sa contrainte axiale moyenne soit égale à la contrainte moyenne Σ_M dans la macrozone considérée pour une contrainte macroscopique unitaire. En première approximation, la valeur de Σ_M a été évaluée par un calcul élément fini modélisant une macrozone comme une inclusion homogène anisotrope en surface dans une matrice dont le comportement est celui du polycristal isotrope [6], en tenant compte uniquement de la contrainte axiale. Pour les orientations [G] et [BOb], la moyenne de l'indicateur d'amorçage $\langle I \rangle$ atteint 0.841 et 0.835, respectivement, dans une macrozone M1, ainsi

que 0.77 et 0.765, respectivement, dans une macrozone M2, ces valeurs encadrant celles obtenues dans le cas non-texturé (Tab. 1). La description proposée rend donc compte de manière qualitative du caractère nocif des macrozones de type M1.

5. Conclusion

Dans les 2 exemples proposés, les calculs d'agrégats polycristallins, mis en oeuvre selon 2 stratégies différentes mais complémentaires, constituent un outil interprétatif pour l'identification des configurations cristallographiques locales favorisant l'amorçage des fissures de fatigue et l'étude des forces motrices pilotant ce processus. Au cours de l'étude relative à l'acier 316LN, les simulations ont été réalisées avec un maillage d'un agrégat polycristallin identifié expérimentalement en 3D, permettant une analyse fine des champs mécaniques locaux à proximité des grains où des fissures ont été observées. Cependant, la caractérisation 3D de la microstructure et son maillage restent à ce jour des tâches lourdes ce qui limite l'application d'une telle démarche à quelques sites d'amorçage seulement. La seconde étude (alliage de titane TA6V) a porté sur l'évaluation statistique de la distribution des champs mécaniques locaux au sein des grains par famille d'orientation, nécessitant de simuler la réponse d'un nombre important d'agrégats définis par tirage aléatoire des orientations cristallines (en se limitant à une description morphologique très simplifiée et à la réponse élastique). De telles informations permettent d'expliquer les domaines d'orientation (et les textures) favorisant l'activation du glissement plastique et l'amorçage. Les principaux verrous limitant l'utilisation de ces approches à des fins plus prédictives portent sur les points suivants: (i) la modélisation physique et la simulation de la localisation du glissement cyclique (cf. exposé de M. Sauzay) pouvant nécessiter de considérer les échelles inférieures (dynamique des dislocations, simulations atomistiques), le développement (ii) de schémas numériques rendant accessible la simulation d'un grand nombre de cycles et (iii) d'outils robustes de description et de maillage d'agrégats de morphologie 3D complexe.

Remerciements

L'étude consacrée au 316LN a été réalisée, dans le cadre du projet ANR AFGRAP, avec la collaboration de Thomas Ghidossi et d'Emmanuel Lacoste. Les résultats de simulation relatifs au TA6V sont issus des travaux de thèse de Van Truong Dang. Que toutes ces personnes en soient vivement remerciées.

Références

- [1] J. Man, K. Obrtlík, J. Polak, Extrusions and intrusions in fatigued metals Part 1. State of the art and history, *Phil. Mag.* 89 (2009) 1295-1336
- [2] D. L. McDowell, F. P. E. Dunne, Microstructure-sensitive computational modeling of fatigue crack formation, *Int. J. Fatigue* 32 (2010) 1521-1542
- [3] L. Signor, P. Villechaise, T. Ghidossi, E. Lacoste, M. Gueguen, S. Courtin, Influence of local crystallographic configuration on microcrack initiation in fatigued 316LN stainless steel: Experiments and crystal plasticity finite elements simulations, *Mat. Sci. Eng. A* 649(2016) 239-249
- [4] M. Sauzay, Cubic elasticity and stress distribution at the free surface of polycrystals, *Acta Mater.* 55 (2007) 1193-1202
- [5] F. Bridier, Analyse expérimentale des modes de déformation et d'endommagement par fatigue à 20°C d'alliages de titane: aspects cristallographiques à différentes échelles, Thèse, Université de Poitiers, 2006
- [6] V. T. Dang, Etude numérique statistique des champs locaux de contraintes en surface de polycristaux cubiques et hexagonaux en élasticité, Thèse, ENSMA Poitiers, 2016