



**HAL**  
open science

## Mise en place d'un modèle de zone cohésive à base physique dans un bicristal de gamma-TiAl

Dominique Geoffroy, Vincent Chiaruttini, Jérôme Crépin, Eva Héripéré, Arjen Roos

### ► To cite this version:

Dominique Geoffroy, Vincent Chiaruttini, Jérôme Crépin, Eva Héripéré, Arjen Roos. Mise en place d'un modèle de zone cohésive à base physique dans un bicristal de gamma-TiAl. 10e colloque national en calcul des structures, May 2011, Giens, France. 8 p. <hal-00592923>

**HAL Id: hal-00592923**

**<https://hal.science/hal-00592923v1>**

Submitted on 3 May 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire HAL, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



HAL Authorization

## Mise en place d'un modèle de zone cohésive à base physique dans un bicristal de $\gamma$ -TiAl.

D. Geoffroy<sup>1,2</sup>, V. Chiaruttini<sup>1</sup>, J. Crépin<sup>2</sup>, É. Héripéré<sup>3</sup>, A. Roos<sup>1</sup>

<sup>1</sup> DMSM/MNU, ONERA, France, {dominique.geoffroy arjen.roos vincent.chiaruttini}@onera.fr

<sup>2</sup> Centre des Matériaux, MINES-ParisTech, France, jerome.crepin@mines-paristech.fr

<sup>3</sup> LMS, Ecole Polytechnique ParisTech UMR CNRS 7649, France, heripre@lms.polytechnique.fr

**Résumé** — Ces travaux proposent d'étudier numériquement l'effet d'une fissure intragranulaire modélisée par des éléments cohésifs dans un bicristal de  $\gamma$ -TiAl. Les effets de la fissure, insérée dans le premier grain, sont étudiés dans le second grain à la suite d'un calcul de traction monotone en plasticité cristalline. Des critères de fissuration intragranulaire fonction de la déformation plastique équivalente induite par les macles sont étudiés afin de prédire la rupture du bicristal. L'état de contrainte normal au joint de grains est ensuite examiné afin d'évaluer la compétition entre la rupture intergranulaire et intragranulaire.

**Mots clés** — TiAl, fissure, zones cohésives, plasticité cristalline

### 1 Introduction

Dans le domaine de l'industrie aéronautique, le poids est depuis toujours une contrainte importante de conception qui affecte la consommation de carburant et l'efficacité de l'appareil. Puisqu'une part importante du poids réside dans le moteur, il pourrait être avantageux d'utiliser d'autres matériaux. Le TiAl, un alliage plus léger que le matériau actuellement utilisé dans la fabrication des aubes de turbine, semble être adapté pour certaines plages de températures, donc certains étages de la turbine. Cependant, l'utilisation de ce matériau reste très limitée, en raison de sa faible ductilité à température ambiante et de la forte sensibilité des propriétés mécaniques sur les paramètres microstructuraux. Il est donc nécessaire d'étudier le comportement mécanique du matériau en fonction de sa microstructure.

Plusieurs travaux ont été effectués sur cet alliage durant les dernières décennies [4, 18, 20]. Parmi ceux-ci, Héripéré *et al.* [7] ont développé une stratégie de couplage entre une étude numérique et expérimentale pour identifier les paramètres de la loi de comportement plastique cristalline. Des calculs par éléments finis en plasticité cristalline peuvent donc être effectués en fonction de ces paramètres, comme l'ont fait entre autres Héripéré [6], Kabir *et al.* [8], Roos *et al.* [13] ainsi que Roters *et al.* [14]. Par ailleurs, Simkin *et al.* [15] ont montré que l'amorçage des fissures coïncidait avec l'activation de la déformation plastique de macles. La propagation se réalise suivant les plans de macles ou les joints de grains en fonction de l'orientation cristallographique des grains et du chargement considérés. Fallahi *et al.* [3] ont développé des critères d'initiation de fissures, en fonction de la désorientation cristallographique entre deux grains, de la normale du joint de grain, ainsi que de l'effort macroscopique appliqué. Ces critères peuvent prédire statistiquement, pour le  $\gamma$ -TiAl étudié (Ti-48Al-2Cr-2Nb), la tendance d'une fissure à se propager le long des joints de grains ou à l'intérieur de ceux-ci. Finalement, Werwer *et al.* [19] ont simulé la propagation d'une fissure par éléments cohésifs en trois dimensions dans du TiAl lamellaire homogénéisé.

Les présents travaux proposent d'étudier par éléments finis la propagation d'une fissure dans un bicristal de  $\gamma$ -TiAl. En raison des études expérimentales préalablement citées [15, 3], deux types de fissuration sont admis : intergranulaire (i.e. la propagation se fait le long des joints de grains) et intragranulaire le long des plans de macles. Il existe néanmoins une compétition entre ces mécanismes. L'objectif est de vérifier l'état de contrainte local et la déformation plastique induite par une fissure intragranulaire dans un joint de grain de  $\gamma$ -TiAl.

Ces travaux s'inscrivent dans une étude plus large sur la fissuration des polycristaux de  $\gamma$ -TiAl. Certains paramètres matériaux utilisés dans cette étude sont actuellement inconnus, ce qui a nécessité certaines approximations. Cette étude vise donc à mettre en oeuvre et valider une méthode numérique, plutôt

que de modéliser exactement le comportement du matériau.

## 2 Démarche

L'objet de l'étude est d'évaluer dans un joint de grains de  $\gamma$ -TiAl l'état de contrainte local et la déformation plastique induite par une fissure intragranulaire lors d'un essai de traction monotone. Pour ce faire, une étude numérique de huit bicristaux de ce matériau est effectuée. Puisqu'il a été montré que les fissures intragranulaires dans ce matériau se propagent le long des plans de macles [3, 15, 16], seuls ces plans peuvent se fissurer dans le modèle utilisé. Un bicristal est donc discrétisé dans un maillage éléments finis. Les éléments au-dessus du joint de grain forment le premier grain, tandis que ceux au-dessous le deuxième grain, comme montré à la figure 1.

Comme le maillage est par la suite soumis à une série de calculs éléments finis où l'orientation cristallographique des grains est modifiée, le plan de macle le plus actif du premier grain, déterminé par le facteur de Schmid, est explicitement discrétisé. Il est positionné de manière à ce qu'il croise le joint de grain. À ce stade, un premier calcul sans fissure est effectué afin de comparer les systèmes de déformation actifs en l'absence de fissure à ceux actifs lorsque la fissuration est incluse dans le premier grain du modèle.

Des éléments d'interfaces et une préfissure sont ensuite ajoutés sur le plan discrétisé précédemment afin de modéliser la fissuration intragranulaire sur le plan de macle du premier grain. Des simulations numériques par éléments finis sont ensuite effectuées sur ces maillages. Pour chacun des modèles, la contribution de chacun des systèmes de maclage à la déformation plastique est vérifiée en pointe de fissure dans le grain non fissuré. Une comparaison est ensuite effectuée avec les résultats expérimentaux de Simkin [16] sur un polycristal de  $\gamma$ -TiAl afin de corroborer les résultats numériques et de vérifier si un critère en déformation plastique de macles peut être utilisé pour déterminer la trajectoire d'une fissure et approximer la contrainte normale critique d'un joint de grains lors d'un calcul sur un polycristal.

## 3 Paramètres de modélisation

Du fait que l'étude consiste en une simulation numérique du  $\gamma$ -TiAl, des paramètres de modélisation et des hypothèses doivent être formulées. Les prochaines sous-sections présentent les propriétés du matériau étudié, les bicristaux modélisés, les lois de comportements utilisées, ainsi que le chargement appliqué au modèle.

### 3.1 Matériau

Le matériau étudié est la phase  $\gamma$  du TiAl à structure  $L1_0$  légèrement quadratique à faces centrées. Trois mécanismes de déformation sont présents dans ce matériau [12]. Ceux-ci sont les dislocations ordinaires  $\frac{1}{2} \langle 1\bar{1}0 \rangle \{111\}$ , les superdislocations  $\langle 01\bar{1} \rangle \{111\}$ , ainsi que le maclage  $\frac{1}{2} \langle 11\bar{2} \rangle \{111\}$ . Lors du calcul par éléments finis, les macles sont traitées comme du glissement unidirectionnel. Par abus de langage, ce mécanisme de déformation sera appelé « glissement équivalent ».

### 3.2 Bicristaux étudiés

Un bicristal tridimensionnel de  $\gamma$ -TiAl de taille  $10 \times 10 \times 20 \text{ mm}^3$ , dont le joint de grain est défini par  $\beta$ , l'angle dans le plan  $z = 0$  entre le joint de grain et le plan  $y = 0$ , est maillé à l'aide d'éléments linéaires tétraédriques. Puis, une discrétisation du plan de macle le plus sollicité est ajoutée afin de générer deux maillages différents :

- 1) Un maillage seulement constitué d'éléments volumiques.
- 2) Un maillage où des éléments d'interfaces sont insérés sur le plan de macles le plus sollicité du premier grain. Les éléments d'interfaces sont également linéaires. Certains éléments sont considérés comme totalement endommagés dès le début du calcul numérique afin de simuler une préfissure.

Un exemple de maillage est présenté à la figure 1.

Les orientations cristallographiques et les angles des joints de grains choisis sont tirés d'un polycristal de  $\gamma$ -TiAl sur lequel Simkin [16] a effectué des essais expérimentaux. L'angle  $\beta$  a été déterminé en surface de l'échantillon. Sur les quatre premiers bicristaux étudiés, il y a eu propagation intergranulaire de la fissure, tandis qu'elle fut intragranulaire sur les quatre derniers. Les orientations cristallographiques des bicristaux étudiés sont présentées au tableau 1. Les angles d'Euler du premier et du second grain sont respectivement les triplés de chaque bicristal  $(\phi_1^1, \phi_1^2, \phi_1^3)$  et  $(\phi_2^1, \phi_2^2, \phi_2^3)$  dans le repère  $(X, Y, Z)$  du maillage.

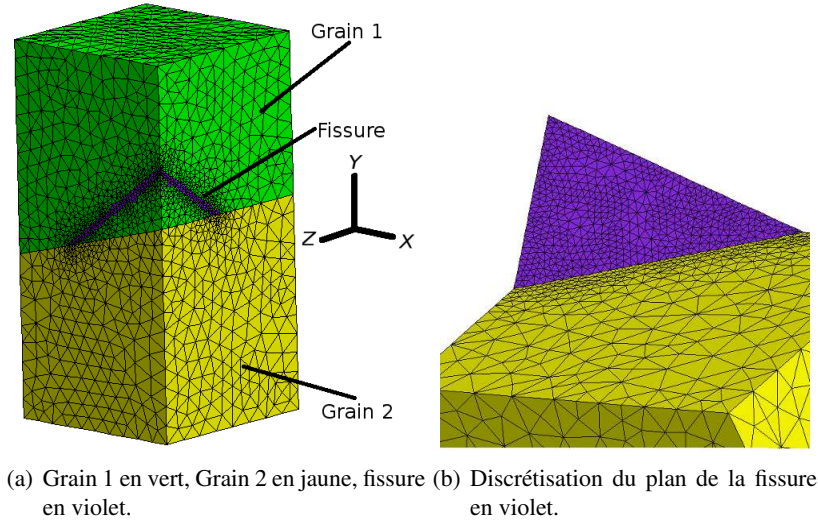


FIG. 1 – Exemple d'un maillage (bicristal 2).

TAB. 1 – Angles d'Euler ( $^\circ$ ), angles  $\beta$  ( $^\circ$ ) entre le joint de grains et le plan  $y = 0$  et le type de propagation de fissure observé expérimentalement des bicristaux étudiés [16].

	Angles d'Euler						Angle $\beta$	propagation
	Grain1			Grain2				
	$\phi_1^1$	$\phi_2^1$	$\phi_3^1$	$\phi_1^2$	$\phi_2^2$	$\phi_3^2$		
Bicristal 1	120.96	26.89	-55.51	136.85	77.16	94.16	0	intergranulaire
Bicristal 2	145.3	46.51	74.86	143.13	86.19	114.97	15	intergranulaire
Bicristal 3	153.43	26.94	253.79	139.09	68.05	14.13	36	intergranulaire
Bicristal 4	132.77	33.28	16.44	157.25	71.88	109.58	6	intergranulaire
Bicristal 5	131.76	32.47	-86.52	120.96	26.89	-55.51	19	intragranulaire
Bicristal 6	131.76	32.47	-86.52	96.23	72.92	141.74	24	intragranulaire
Bicristal 7	145.3	46.51	74.86	96.01	69.88	154.65	17	intragranulaire
Bicristal 8	109.65	80.45	188.29	153.43	26.94	253.79	21	intragranulaire

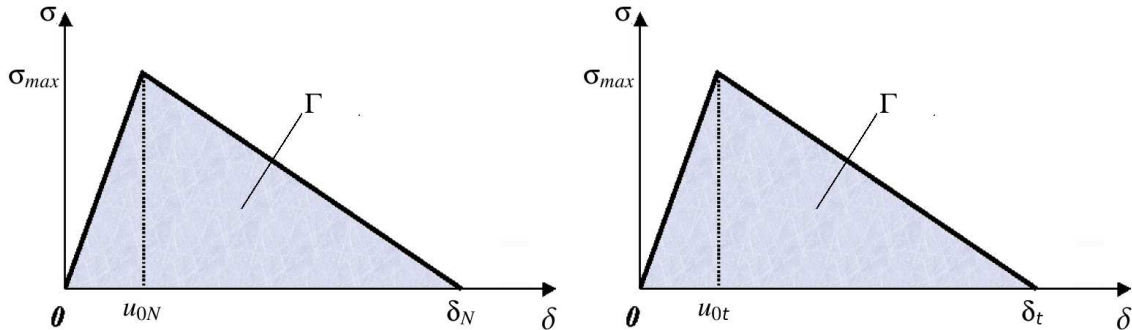
### 3.3 Lois de comportement et chargement

Les éléments volumiques sont modélisés à l'aide d'une loi de comportement élastoviscoplastique cristalline avec écrouissage linéaire [1, 2]. La matrice d'écrouissage  $\underline{h}$  est supposée diagonale (avec un autoécrouissage  $h_0=1230$  MPa pour tous les systèmes de glissement, déterminé par Gélébart [5]). L'écrouissage latent n'est pas considéré, car celui-ci est inconnu pour le  $\gamma$ -TiAl. Les cissons critiques utilisées proviennent de l'identification réalisée à partir des résultats de mesures de champs de déformation [5] et sont  $\tau_{0_{ordinaire}} = 250$  MPa,  $\tau_{0_{super}} = 333$  MPa, et  $\tau_{0_{maclage}} = 250$  MPa.

Le tenseur d'élasticité est pris égal au tenseur quadratique mesuré expérimentalement sur monocristal [17]. Avec la notation de Voigt, ces paramètres sont  $C_{11} = C_{22} = 183$  GPa,  $C_{12} = C_{21} = C_{13} = C_{31} = C_{23} = C_{32} = 74.1$  GPa,  $C_{33} = 178$  GPa,  $C_{13} = C_{55} = 105$  GPa,  $C_{66} = 78.4$  GPa et tous les autres coefficients non-mentionnés sont nuls.

Les éléments d'interfaces sont modélisés à l'aide d'une loi cohésive bilinéaire de type Crisfield [11], présentée sur les figures 2(a) et 2(b). Étant donné que les paramètres de cette loi de la phase  $\gamma$  du TiAl

sont inconnus, les paramètres d'ouvertures associés à la phase lamellaire [19], supposés du bon ordre de grandeur, sont utilisés. De plus, comme il est considéré que le matériau ne tolère que peu de glissement équivalent induit par les macles, la contrainte maximale  $\sigma_{max}$  est prise égale à la cission critique résolue de ce mécanisme de déformation. Les propriétés de l'interface sont les suivantes  $\sigma_{max} = 250$  MPa,  $\delta_N = \delta_t = 24 \mu m$ ,  $u_{0N} = u_{0t} = 0.01 \mu m$ , ce qui impose une énergie de décohésion  $\Gamma = 3$  N/mm. Le chargement est une traction monotone. Il est perpendiculaire au plan  $y = 0$  et varie linéairement de 0 à 0.2 mm en 200 s.



(a) Loi d'interface utilisée dans la direction normale de l'élément (b) Loi d'interface utilisée dans les directions tangentielles de l'élément

FIG. 2 – Loi de comportement adoptée pour les éléments d'interfaces

## 4 Résultats

Les variations des champs de déformation plastique dus aux macles entre les calculs avec et sans fissure sont tout d'abord présentées. Puis, une comparaison des calculs entre les différents bicristaux fissurés est effectuée. Finalement, des critères fonction du glissement équivalent des macles permettant de déterminer la trajectoire d'une fissure est abordé.

### 4.1 Différences entre les calculs avec et sans fissure

Puisque l'ajout d'une fissure dans le premier grain change l'état de contrainte local, il est possible que les systèmes de glissement activés dans le second grain soient différents. Pour vérifier cette hypothèse, une comparaison des calculs sur un maillage avec et sans fissure est effectuée. Le maillage du calcul sans fissure est rigoureusement le même que celui en présence de fissure, à l'exception près que les éléments cohésifs ne sont pas insérés et les noeuds discrétisant les lèvres de la fissure sont fusionnés. La position du front de fissure est donc discrétisée dans le maillage sans fissure, sans toutefois pouvoir s'ouvrir. En raison des fortes variations des niveaux de déformation autour du front de fissure, le glissement équivalent induit par les macles a tout d'abord été déterminé en moyennant sur un rayon 0.3 mm l'activité plastique des macles aux points d'intégration situés sur des éléments volumiques dont au moins un noeud est sur le front de fissure. Puis, à chaque incrément de calcul, le glissement équivalent maximal induit par les macles a été retenu pour chacun de ces systèmes de déformation. Une comparaison des glissements équivalents issus de chacun des systèmes de déformation de macles avec et sans fissuration des bicristaux 4 et 5 est présentée aux figures 3(a) et 3(b).

Comme attendu, l'insertion de la fissure dans le premier grain vient modifier le glissement équivalent induit par les macles dans le second grain en raison de la concentration de contraintes. Néanmoins, le premier système de maillage à être activé dans le second grain en présence d'une fissure est également le premier à s'activer en l'absence de fissure. Ce phénomène est observé pour les huit bicristaux étudiés, même si l'activation du glissement équivalent induit par les macles est fortement hâtée par la présence de la fissure, comme montré à la figure 3(a). Le facteur de Schmid semble donc suffisant pour prédire quel système de glissement équivalent induit par les macles s'active en premier dans le cadre d'un bicristal en traction monotone.

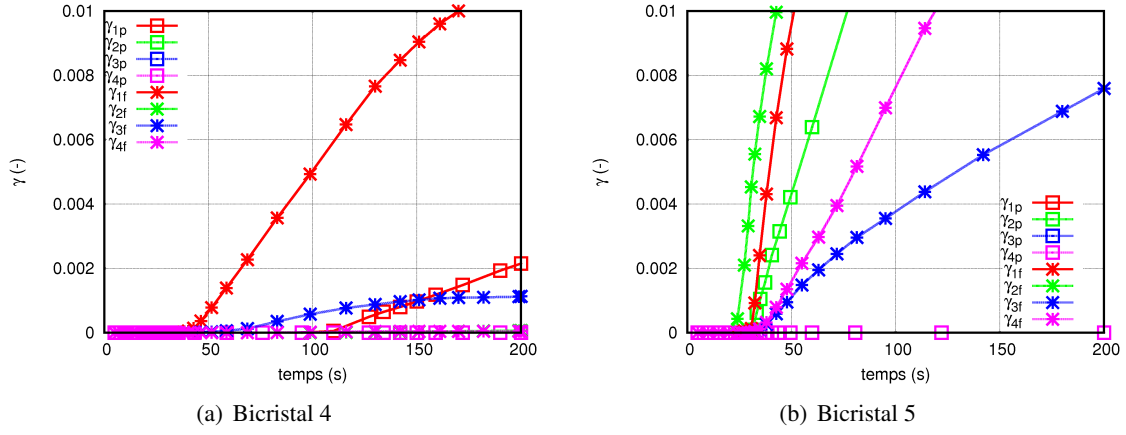


FIG. 3 – Comparaison des glissements équivalents  $\gamma$  induits dans le grain 2 pour chacun des 4 systèmes de maillage entre le calcul sans fissure (p) et avec fissure (f) en fonction du temps pour les bicristaux 4 et 5. Il s’agit des valeurs moyennes maximales, déterminées par la méthode explicitée à la section 4.1.

## 4.2 Comparaison des calculs en fissuration des huit bicristaux

Puisque les orientations cristallographiques des grains sont différentes pour chacun des bicristaux, des maillages différents sont nécessaires pour discrétiser, dans chacun des bicristaux, le plan de macle le plus actif du premier grain. De ce fait, les éléments cohésifs en front de fissure se rompent à des instants également différents. Dans l’optique de comparer adéquatement les résultats des calculs, la variable adimensionnelle  $T = \frac{t}{t_1}$  est utilisée, où  $t$  est le temps et  $t_1$  l’instant déterminé pour chaque bicristal où le paramètre  $\lambda_m = 0.5$ .  $\lambda_m$  est la moyenne de  $\lambda_{max}$ , paramètre d’endommagement de la loi cohésive utilisée [11] ( $\lambda_{max} = 0$  : cohésion parfaite et  $\lambda_{max} = 1$  : décohésion totale) sur tous les points d’intégration des éléments d’interface sur le front de fissure. La variable  $T = 1$  représente, dans chacun des bicristaux, le moment où la fissure dans le premier grain atteint le joint de grain. La figure 4(a) présente les courbes du glissement équivalent du système de maillage le plus actif  $\gamma_{max}$  dans le second grain de chacun des bicristaux en fonction de  $T$ .

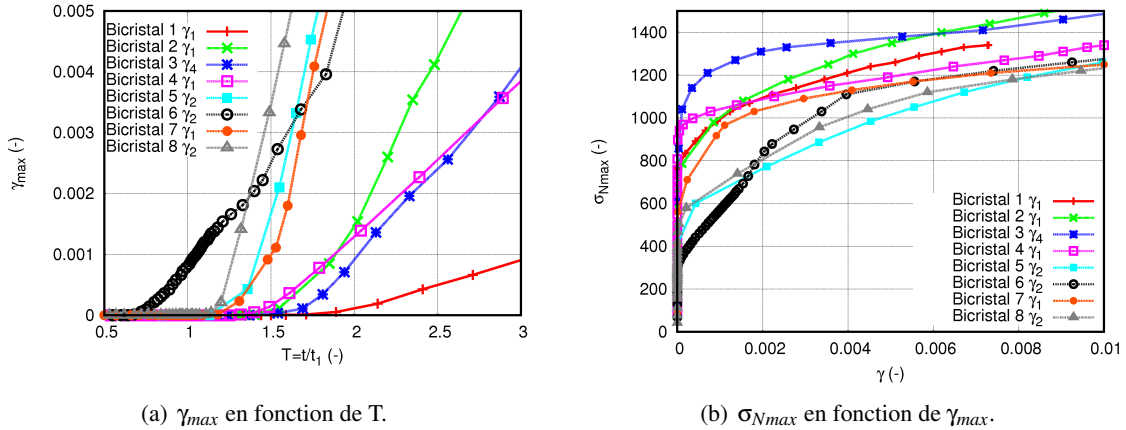


FIG. 4 – Résultats des calculs éléments finis en présence de fissure sur chacun des 8 bicristaux. Il s’agit, pour  $\gamma_{max}$  et  $\sigma_{Nmax}$ , des valeurs moyennes maximales, déterminées par la méthode explicitée aux sections 4.1 et 4.2. Le temps est rendu adimensionnel en prenant, pour chaque bicristal, le ratio  $\frac{t}{t_1}$ , où  $t$  est l’instant considéré, et  $t_1$  l’instant où la fissure atteint le joint de grain, tel qu’expliqué à la section 4.2.

Comme les bicristaux étudiés proviennent de la thèse de Simkin [16], une comparaison entre les calculs numériques et ses résultats expérimentaux est effectuée afin de valider le modèle utilisé. Expérimentalement, lors d’un essai de flexion 4 points sur un polycristal de  $\gamma$ -TiAl, les grains modélisés par les bicristaux 1 à 4 se sont fissurés aux joints de grains. À l’opposé, les grains modélisés par les bicristaux 5 à 8 ont subi une rupture intragranulaire pendant l’essai. Puisque la rupture intragranulaire dans le  $\gamma$ -TiAl est habituellement observée sur les plans de macles [3, 15, 16], le glissement équivalent induit par les

macles dans le grain 2 en front de fissure devrait normalement s'activer en premier pour les bicristaux 5 à 8. À l'opposé, le glissement équivalent induit par les macles devrait s'activer plus tardivement pour les bicristaux 1 à 4, puisqu'ils ont subi une rupture intergranulaire.

Sur la figure 4(a), les bicristaux 5, 6, 7 et 8 sont ceux dont l'activation du glissement dû aux macles est constatée en premier. Puisque la littérature prétend que la fissuration intragranulaire est habituellement observée sur les plans de macle, il est donc cohérent que le maclage s'active tout d'abord sur les bicristaux dont la rupture expérimentale est intragranulaire. Ces résultats sont donc en accord avec les essais expérimentaux de Simkin.

À l'opposé, pour les bicristaux dont la rupture expérimentale est intragranulaire, l'activation du maclage devrait être retardée, ce qui est effectivement constaté. Néanmoins, afin de causer la rupture du joint de grains, la contrainte normale au joint de grains devrait être plus élevée pour ces bicristaux. La figure 4(b) présente la contrainte normale au joint de grain maximale  $\sigma_{Nmax}$  en fonction de  $\gamma_{max}$ . La contrainte normale au joint de grain  $\sigma_N$  est déterminée en moyennant sur un rayon 0.3 mm l'état de contrainte aux points d'intégration situés sur les éléments volumiques dont au moins un noeud est sur le front de fissure. La valeur maximale de  $\sigma_N$ ,  $\sigma_{Nmax}$ , est par la suite déterminée pour chaque incrément du calcul. La contrainte  $\sigma_{Nmax}$  et la déformation  $\gamma_{max}$  sont donc toutes les deux sur le front de fissure, sans nécessairement être localisées au même endroit. La figure 4(b) montre qu'à  $\gamma_{max}$  donné, la contrainte  $\sigma_{Nmax}$  des bicristaux 1 à 4 est plus élevée que dans les bicristaux 5 à 8.

La contrainte  $\sigma_{Nmax}$  peut être utilisée pour estimer la contrainte normale critique  $\sigma_N^c$  d'un joint de grain en fonction d'un critère de déformation plastique maximale induite par les macles  $\gamma_{max}^c$ . Lorsque  $\gamma_{max}$  atteint la valeur critique  $\gamma_{max}^c$ , la fissure intragranulaire du premier grain se propage sur le plan de macles le plus actif du second grain. Néanmoins, la fissure peut aussi se propager dans le joint de grain, si  $\sigma_{Nmax}$  atteint une valeur critique  $\sigma_N^c$ . Il y a donc une compétition entre ces deux mécanismes de rupture, en fonction de l'état de contrainte local. Les contraintes  $\sigma_{Nmax}$  des huit bicristaux étudiés sont présentées au tableau 2 pour différentes valeurs de  $\gamma_{max}^c$ .

Puisque les bicristaux 1 à 4 ont expérimentalement subi une rupture intergranulaire, à l'instant où le critère de rupture  $\gamma_{max}^c$  est atteint, le joint de grain est déjà rompu. La contrainte  $\sigma_{Nmax}$  déterminée à cet instant est donc supérieure à  $\sigma_N^c$ . Pour les bicristaux 5 à 8, comme il y a eu rupture intragranulaire,  $\sigma_{Nmax}$  est au contraire inférieure à  $\sigma_N^c$ . Pour chacun des critères utilisés, des plages de valeurs, fonction de  $\gamma_{max}^c$ , peuvent être établies afin de quantifier la contrainte normale critique  $\sigma_N^c$  du joint de grain. La limite inférieure de la plage est déterminée en moyennant  $\sigma_{Nmax}$  sur les bicristaux où la rupture fut intragranulaire. La même opération est ensuite effectuée avec les bicristaux qui ont subi une rupture intergranulaire pour déterminer la limite supérieure de la plage. Ces plages sont :

- 748 MPa <  $\sigma_N^c$  < 1089 MPa pour  $\gamma_{max}^c = 0.001$
- 968 MPa <  $\sigma_N^c$  < 1203 MPa pour  $\gamma_{max}^c = 0.0025$
- 1256 MPa <  $\sigma_N^c$  < 1316 MPa pour  $\gamma_{max}^c = 0.005$

TAB. 2 – Contraintes normales maximales aux joints de grains  $\sigma_{Nmax}$  des 8 bicristaux étudiés et moyennes de  $\sigma_{Nmax}$  pour les bicristaux ayant subi une rupture intragranulaire et intergranulaire pour différents critères de fissuration fonction du glissement équivalent maximal  $\gamma_{max}^c$ .

	$\sigma_{Nmax}$ (MPa)		
	$\gamma_{max}^c = 0.001$	$\gamma_{max}^c = 0.0025$	$\gamma_{max}^c = 0.005$
Bicristal 1	994	1124	1260
Bicristal 2	997	1161	1323
Bicristal 3	1305	1394	1450
Bicristal 4	1060	1132	1229
Bicristal 5	720	987	1120
Bicristal 6	597	922	1668
Bicristal 7	956	1081	1168
Bicristal 8	719	880	1067
Moyenne intergranulaire	1089	1202.75	1315.5
Moyenne intragranulaire	748	967.5	1255.75

## 5 Discussions

Comme attendu, les calculs effectués sur les bicristaux en traction monotone uniaxiale avec et sans fissure ont montré que la présence d'une fissure dans le premier grain modifie l'état de contrainte en front de fissure dans le second grain. En présence d'une fissure, les mécanismes de déformation associés aux macles sont plus rapidement activés, mais le facteur de Schmid permet toutefois de prédire quels systèmes de déformation de macles seront les premiers à s'activer. L'utilisation explicite de ce terme dans des critères de rupture intergranulaire retrouvés dans la littérature [3, 15, 16] est donc a priori justifiée pour un bicristal. Néanmoins, ce choix pourrait se révéler faux dans le cadre d'un polycristal, en raison de l'état de contrainte au sein des grains du polycristal, qui ne correspond pas nécessairement au chargement uniaxial tel qu'appliqué sur le bicristal. La pertinence de ce terme dans un critère de propagation de fissure dans un polycristal reste donc à vérifier.

Dans le cadre des comparaisons entre les bicristaux fissurés, puisque les valeurs utilisées dans la loi cohésive sont représentatives de la fissuration interlamellaire du TiAl, et non de phase  $\gamma$  du TiAl, seul l'ordre de grandeur peut-être comparé. Kabir [9] a modélisé la propagation de fissures intralamellaires et interlamellaires dans du  $(\alpha + \gamma)$ -TiAl homogénéisé dont les paramètres cohésifs varient selon une loi stochastique. Dans son modèle, la contrainte normale maximale  $\sigma_{Nmax}$  varie de 680 à 820 MPa, pour une énergie de décohésion variant entre 3 et 5 N/mm. Les trois critères  $\gamma_{max}^c$  proposés imposent tous une contrainte normale au joint de grain  $\sigma_{Nmax}$  du même ordre de grandeur.

De plus, la contrainte normale maximale peut également être comparée au paramètre  $\sigma_{max} = 250$  MPa de la loi cohésive utilisée pour la fissuration intragranulaire afin de quantifier la compétition entre les deux types de propagation. En fixant  $\gamma_{max}^c$  de 0.001 à 0.005, la contrainte normale critique est environ de 3 à 5.5 fois plus élevée que celle admise sur les plans de macles. Les joints de grain sont donc considérablement plus résistants que les plans de macles. Sous l'hypothèse que la rupture intergranulaire n'est pas influencée par les efforts de cisaillement, elle survient donc lorsqu'il y a une désorientation cristallographique suffisante entre le plan de macle fissuré dans le premier grain et celui le mieux orienté dans le second grain. Cette désorientation doit induire une contrainte normale au joint de grain au minimum 3 fois plus élevée que la cission résolue du système de maclage le mieux orienté dans le second grain.

Quelques paramètres de modélisation peuvent néanmoins induire des erreurs. En effet, puisque les fissures sont toutes insérées sur les plans de macles les plus actifs des premiers grains, leurs géométries sont fonction des orientations cristallographiques de ces grains. La fissure se propage donc sur un plan formant un angle différent avec le joint de grain dans chacun des modèles, ce qui peut fortement influencer l'état de contrainte local. De plus, une loi de Crisfield dont la raideur initiale ajoute de la souplesse au problème a été utilisée avec les éléments d'interfaces, ce qui a pu influencer le comportement du matériau. Finalement, le joint de grain modélisé dans le calcul est un plan observé en surface d'un polycristal, ce qui ne correspond pas nécessairement à la réalité expérimentale de comparaison. En effet, la position du joint de grain peut différer en surface et à l'intérieur du polycristal. De plus, les essais de Simkin ont été effectués sur des polycristaux, tandis que la simulation numérique modélise les joints de grains à l'aide de bicristaux sous une tension uniaxiale. Puisque les autres grains environnants peuvent influencer l'état de contrainte au joint de grain, il est compréhensible que les simulations numériques ne concordent pas parfaitement avec les résultats expérimentaux.

## 6 Conclusion

Dans l'optique de déterminer un critère de fissuration fonction de la déformation plastique induite par les macles dans le  $\gamma$ -TiAl, des essais numériques avec et sans fissure ont été effectués sur des bicristaux de  $\gamma$ -TiAl. Les résultats des calculs numériques ont été comparés à des données expérimentales issues d'un essai de fissuration sur un polycristal [16] afin de déterminer, en fonction d'un critère de glissement équivalent induit par les macles, si la fissure se propage au joint de grains ou sur les plans de macles d'un bicristal. Il a tout d'abord été montré que le facteur de Schmid est suffisant, dans le cadre d'un bicristal, pour prédire les systèmes de déformation activés en présence d'une fissure. Puis, trois critères ont été utilisés afin de prédire, en fonction de l'activité plastique des macles, le type de rupture observé expérimentalement. Une approximation de la contrainte normale critique du joint de grains a par

la suite été abordée. Les trois critères, soit le glissement équivalent induit pas les macles  $\gamma_{max}^c = 0.001$ ,  $\gamma_{max}^c = 0.0025$  et  $\gamma_{max}^c = 0.005$ , permettent de prédire un ordre de grandeur réaliste de la contrainte normale critique du joint de grains. Ces données peuvent donc être utilisées dans conception d'un modèle de fissuration intergranulaire et intragranulaire à l'aide de zones cohésives dans un polycristal de  $\gamma$ -TiAl. Une future étude expérimentale sur des bicristaux permettrait de quantifier plus précisément la compétition entre la fissuration intragranulaire et intergranulaire dans le  $\gamma$ -TiAl. De plus, il serait intéressant de réutiliser l'approche avec une loi d'interface avec seuil [10].

## Références

- [1] G. Cailletaud, *Une approche micromécanique du comportement des polycristaux*, Rev. Phys. App., 23, pp. 353–363, 1988.
- [2] G. Cailletaud, S. Forest, D. Jeulin, F. Feyel, I. Galliet, V. Mounoury, et S. Quilici, *Some elements of microstructural mechanics*, Comp. Mat. Sc. 27, pp. 351–374, 2003.
- [3] A. Fallahi, D. Mason, D. Kumar, T. Bieler, M. Crimp, *The effect of grain boundary normal on predicting microcrack nucleation using fracture initiation parameters in duplex TiAl*, Mat. Sci. Engin. A 432, pp. 281–291, 2006.
- [4] T. Fujiwara, A. Nakamura, M. Hosomi, S.R. Nishitani, Y. Shirai, M. Yamaguchi, *Deformation of polysynthetically twinned crystals of TiAl with a nearly stoichiometric composition*, Phil. Mag. A 61 (4), pp. 591–606, 1990.
- [5] L. Gélébart, *Approche multi-échelles du comportement mécanique de l'alliage Ti-Al48-Cr2-Nb2*, Thèse de doctorat, École Polytechnique, Palaiseau, France, 2002.
- [6] E. Héripéré, *Méthode de couplage multi-échelles entre simulations numériques polycristallines et mesures de champs pour l'identification des paramètres de lois de comportement et de fissuration des matériaux métalliques. Application à l'étude des alliages TiAl.*, Thèse de doctorat, École Polytechnique, Palaiseau, France, 2006.
- [7] E. Héripéré, M. Dexet, J. Crépin, L. Gélébart, A. Roos, M. Bornert, D. Caldemaison, *Coupling between experimental measurements and polycrystal finite element calculations for micromechanical study of metallic materials* Int. J. of Plasti. 23, pp. 1512–1539, 2007.
- [8] M.R. Kabir, L. Chernova, M. Bartsch, *Numerical investigation of room-temperature deformation behavior of a duplex type  $\gamma$ -TiAl alloy using a multi-scale modeling approach*, Acta Materialia 58, pp. 5834–5847, 2010.
- [9] M.R. Kabir, *Modeling and simulation of deformation and fracture behavior of components made of fully lamellar  $\gamma$ -TiAl alloy*, Ph.D. Thesis, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, Kiel, Allemagne, 2008.
- [10] E. Lorentz, *A mixed interface finite element for cohesive zone models*, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 198, pp. 302–317, 2008.
- [11] Y. Mi, M.A. Crisfield, G.A.O. Davies, H.B. Hellweg, *Progressive delamination using interface elements*, J. Compos. Mater. 32, p.1246–1272, 1998.
- [12] J.D.H Paul, F. Appel, R. Wagner, *The compression behaviour of niobium alloyed  $\gamma$ -titanium aluminides*, Acta Mater. 46, pp. 1075–1085, 1998.
- [13] A. Roos, J.-L. Chaboche, L. Gélébart, J. Crépin, *Multiscale modelling of titanium aluminides*, Int. J. Plast. 20, pp. 811–830, 2004.
- [14] F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D.D. Tjahjanto, T.R. Bieler, D. Raabe, *Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite element modeling : Theory, experiments, applications*, Acta Materialia 58, pp. 1152–1211, 2010.
- [15] B.A. Simkin, B. Ng, M. Crimp, T. Bieler, *Crack opening due to deformation twin shear at grain boundaries in near  $\gamma$ -TiAl*, Intermetallics 15, pp. 55–60, 2007.
- [16] B.A. Simkin, *Tensile crack initiation in  $\gamma$ -TiAl*, Ph.D. Thesis, Michigan State University, East Lansing, United States of America, 2003.
- [17] K. Tanaka, T. Ichitubo, H. Inui, M. Yamaguchi, M. Koiwa *Single-crystal elastic constants of  $\gamma$ -TiAl*, Phil. Mag. 73 (2), pp. 71–78, 1996.
- [18] H. Umeda, K. Kishida, H. Inui, M. Yamaguchi, *Effects of Al-concentration and lamellar spacing on the room-temperature strength and ductility of PST crystals of TiAl*, Mat. Sc. Eng. A239–240, pp. 336–343, 1997.
- [19] M. Werwer, R. Kabir, A. Cornec, K.-H. Schwalbe, *Fracture in lamellar TiAl simulated with the cohesive model*, Engineering Fracture Mechanics 74, pp. 2615–2638, 2007.
- [20] M. Yamaguchi, H. Inui, S. Yokoshima, K. Kishida, D.R. Johnson, *Recent progress in our understanding of deformation and fracture of two-phase and single-phase TiAl alloys*, Mater. Sc. and Eng A213, pp. 25–31, 1996.