



**HAL**  
open science

# Nano composites élaborés par consolidation de nano poudres métalliques : caractérisation expérimentale et modélisation micromécanique

Quang-Hien Bui, Salah Ramtani, Guy Dirras, Renald Brenner, Yann Charles

► **To cite this version:**

Quang-Hien Bui, Salah Ramtani, Guy Dirras, Renald Brenner, Yann Charles. Nano composites élaborés par consolidation de nano poudres métalliques : caractérisation expérimentale et modélisation micromécanique. CFM 2007 - 18ème Congrès Français de Mécanique, Aug 2007, Grenoble, France. hal-03362367

**HAL Id: hal-03362367**

**<https://hal.science/hal-03362367v1>**

Submitted on 1 Oct 2021

**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.

## Formulation incrémentale d'un modèle micromécanique impliquant les joints des grains : application aux matériaux à grains ultrafins

Quang Hien BUI, Salah RAMTANI, Guy DIRRAS, Renald BRENNER & Yann CHARLES

Laboratoire des Propriétés Mécaniques et Thermodynamiques des Matériaux,  
LPMTM – CNRS UPR 9001  
Université Paris 13, 99 avenue J. B. Clément 93430 Villetaneuse, France  
bui@lpmtm.univ-paris13.fr

### Résumé :

*Le comportement mécanique macroscopique des matériaux à grains ultrafins semble être affecté par la contribution des joints de grains. Forts de ce constat, nous avons reformulé et implémenté le modèle auto cohérent généralisé, récemment développée par (Jiang et Weng, 2004), intégrant différents aspects tels que la taille des grains, l'épaisseur des joints de grains avec leurs comportements spécifiques respectifs. De part les tous premiers résultats de simulation, ce modèle est jugé suffisamment pertinent pour être par la suite appliqué à nos matériaux élaborés par compaction isostatique à chaud (Billard, 2004) de nanopoudres métalliques.*

### Abstract :

*In ultrafine grained materials, the grain boundaries seem to play a considerable part in the macroscopic mechanical response. Taking advantage of this, we reformulated and implemented the generalized self consistent model, recently developed by (Jiang and Weng, 2004), taking into account various aspects such as the size of the grains, the thickness of the grain boundaries with their respective specific behaviours. With respect to the first numerical results, this model is judged sufficiently relevant to be applied thereafter to our materials performed by hot isostatic compaction (Billiards and Al, 2005) of metallic nanopowders.*

### Mots-clefs :

**Micromécanique ; Matériaux nanocristalins, Modélisation**

### 1 Introduction

D'une façon générale, une réduction de la taille des grains s'accompagne d'une modification en profondeur des propriétés mécaniques comme l'illustrent les différentes formulations, plus ou moins élaborées, de la loi de Hall et Petch (Hall, 1951 ; Petch, 1953). La contribution présentée ici s'inscrit dans le cadre d'un programme de recherche ayant pour objet l'étude des mécanismes de déformation et d'endommagement des matériaux à grains ultrafins ( $d < 1000$  nm, où  $d$  représente la taille moyenne des grains), pour des applications structurales ou fonctionnelles (Billard, 2004 ; Billard et al., 2006). Globalement, ce travail intègre divers aspects : élaboration des matériaux, en particulier par métallurgie des poudres ; caractérisation des microstructures obtenues et identification des mécanismes de déformation et d'endommagement associés; modélisation micromécanique du comportement. C'est ce dernier point qui est abordé ici : il présente en particulier la formulation incrémentale d'un modèle auto cohérent généralisé, récemment développée par (Jiang et Weng, 2004), intégrant les notions de tailles de grains et de joints de grains avec leurs comportements spécifiques respectifs et leur influence sur le comportement macroscopique global. La démarche théorique de référence

repose sur le principe de superposition, en découpant le problème initial en deux sous problèmes résolus séparément de manière analytique par (Christensen et Lo, 1979) et (Luo et Weng, 1987). La plasticité du grain est considérée ici comme la manifestation mésoscopique de mécanismes microstructuraux que nous supposons ici quantifiés, à un niveau déjà intégré de description, par un certain nombre de variables scalaires  $\gamma^{(s)}$  représentant le glissement cumulé. Le joint de grains est supposé insensible à la pression hydrostatique, amorphe et représenté par le modèle élastoplastique de Ludwik.

## 2 Formulation du modèle

La démarche repose sur le principe de superposition (FIG. 1), de deux sous problèmes plus simples et déjà traités (Christensen et Lo, 1979 ; Luo et Weng, 1987).

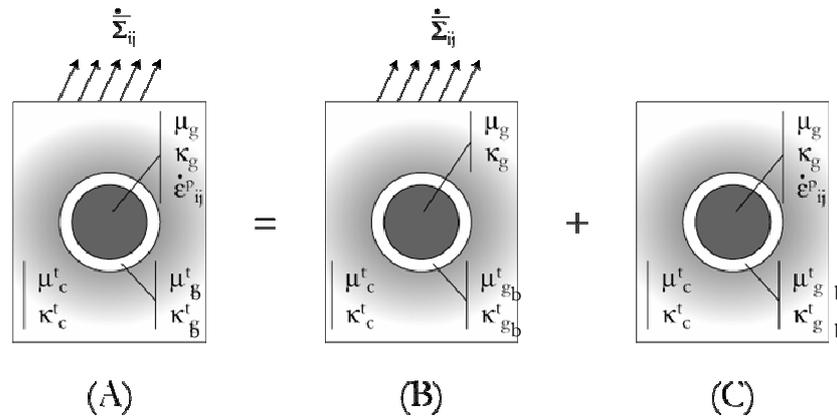


FIG. 1 – (A) Problème que l'on cherche à résoudre, séparé en deux sous problèmes qui ont été traités par (B) Christensen et Lo, 1979 et (C) Luo et Weng, 1987.

Le grain est modélisé par une sphère entourée d'une interphase sphérique simulant le joint de grain. La matrice du volume ainsi défini représente le comportement du matériau. Le problème à trois phases est séparé en un problème de détermination du champ de contrainte dans toutes les phases lorsque le volume est soumis à un chargement donné  $\Sigma_{ij}$  (FIG. 1A), et à un problème de détermination des contraintes locales en présence d'une déformation libre dans l'inclusion. Les grandeurs associées au grain seront repérées grâce à l'indice (g), celles relatives au joint de grain par l'indice (gb) et enfin, celles du matériau homogène (ou composite) via l'indice (c). Les tenseurs dérivant de la solution du problème (B) sont identifiés par une lettre majuscule portant une barre et ceux relatifs au problème (C) par une lettre minuscule portant un tilde.

### 2.1 Comportement mécanique des deux phases

A l'échelle mésoscopique, le comportement élastoplastique du grain (g) est représenté par la relation constitutive

$$\bar{\dot{\sigma}}_{ij}^{(g)} = C_{ijkl}^{(g)} \left( \bar{\dot{\epsilon}}_{kl}^{(g)} - \sum_s \nu_{kl}^{(s)} \dot{\gamma}^{(s)} \right) \quad (1)$$

où  $\bar{\dot{\sigma}}_{ij}^{(g)}$ ,  $\bar{\dot{\epsilon}}_{kl}^{(g)}$  et  $\nu_{kl}^{(s)}$  représentent respectivement les composantes du tenseur moyen du taux de contrainte de Cauchy, du tenseur moyen du taux de déformation linéarisé et du tenseur de

Schmid pour le système (s). L'écriture de la condition de consistance permet d'établir la loi d'évolution du glissement cumulé en fonction du taux de contrainte macroscopique  $\dot{\Sigma}$

$$\dot{\gamma}^{(s)} = f^{(s)} \dot{\Sigma}_{ij} \quad (2)$$

où

$$\begin{cases} f_{pq}^{(s)} = \sum_{s'} (X^{ss'})^{-1} \nu_{ij}^{(s')} C_{ijkl}^{(g)} \bar{M}_{klpq}^{(g)} \\ X^{ss'} = h^{(ss')} - \nu_{ij}^{(s)} C_{ijkl}^{(g)} (\tilde{H}_{klpq}^{(g)} - \delta_{klpq}) \nu_{pq}^{(s')} \\ \tilde{H}_{ijkl}^{(g)} = \tilde{\beta}_g \delta_{ijkl} + \frac{1}{3} (\tilde{\alpha}_g - \tilde{\beta}_g) \delta_{ij} \delta_{kl} \end{cases} \quad (3)$$

L'activation d'un système (s) est effective si la scission  $\tau_{ij}^{(s)} = \nu_{ij}^{(s)} \bar{\sigma}_{ij}^{(g)}$  qui lui est appliquée est égale à la scission critique  $\tau_c = \tau_\infty + k_0 d^{1/2}$ , et si

$$\dot{\tau}^{(s)} = \sum_{s'} h^{(ss')} \dot{\gamma}^{(s')} \quad (4)$$

La matrice d'écroissage  $h^{ij}$  est supposée affectée par la taille des grains

$$h^{ij} = \left( h_\gamma + \frac{a_0}{\sqrt{d}} \right) (q + (1-q) \delta^{ij}) \quad (5)$$

où  $q$  détermine le degré d'écroissage latent. Par ailleurs, l'écroissage instantané  $h_\gamma$  est supposé dépendre de l'histoire de la déformation via le glissement cumulé  $\gamma^{acc}$  selon une loi saturante

$$h_\gamma = h_{final} \left( 1 + (h_{ratio} - 1) e^{-h_{exp} \gamma^{acc}} \right) \quad (6)$$

où  $h_{final}$ ,  $h_{ratio}$  et  $h_{exp}$  sont des paramètres matériaux à identifier.

La plasticité isotrope et incompressible du joint de grain est décrite par une loi de Ludwik

$$\sigma_e^{(gb)} = \sigma_y^{(gb)} + h_{(gb)} (\varepsilon_e^{p(gb)})^{n_{(gb)}} \quad (7)$$

où  $\sigma_e^{(gb)}$  est la contrainte équivalente de Von Mises,  $\sigma_y^{(gb)}$  est la limite d'élasticité initiale du joint de grain,  $h_{(gb)}$  est le coefficient de Ludwik,  $n_{(gb)}$  est le coefficient d'écroissage et  $\varepsilon_e^{(gb)}$  la déformation plastique équivalente cumulée. Le comportement élastoplastique du joint de grain est remplacé par le comportement du matériau élastique équivalent dont les modules tangents sont donnés par

$$\begin{cases} E_{(gb)}^t = \left( \frac{1}{E_{(gb)}} + \frac{d\varepsilon_e^{p(gb)}}{d\sigma_e^{(gb)}} \right)^{-1}, \quad \nu_{(gb)}^t = \frac{1}{2} - \left( \frac{1}{2} - \nu_{(gb)} \right) \frac{E_{(gb)}^t}{E_{(gb)}} \\ \kappa_{(gb)}^t = \left( \frac{E_{(gb)}^t}{3(1-2\nu_{(gb)}^t)} \right), \quad \mu_{(gb)}^t = \left( \frac{E_{(gb)}^t}{2(1+\nu_{(gb)}^t)} \right) \end{cases}, \quad (8)$$

modules tangents qui sont actualisés à mesure que le chargement (et donc la déformation plastique) évolue.

## 2.2 Tenseurs de localisation et de concentration

Avec l'aide de l'équation (2), les tenseurs de concentration des contraintes  $(\bar{B}_{ijkl}^{(*)} + \tilde{b}_{ijkl}^{(*)})$  et de localisation  $A_{ijkl}^{(*)}$  des déformations s'écrivent

$$\dot{\bar{\sigma}}_{ij}^{(*)} = (\bar{B}_{ijkl}^{(*)} + \tilde{b}_{ijkl}^{(*)}) \dot{\Sigma}_{kl} \quad \text{et} \quad \dot{\epsilon}_{ij}^{(*)} = \{\bar{M}_{ijrs}^{(*)} + \tilde{m}_{ijrs}^{(*)}\} \mathcal{L}_{rskl}^c \dot{E}_{kl} = A_{ijkl}^{(*)} \dot{E}_{kl}, \quad (9)$$

avec  $(*) \in \{g, gb\}$ . Les coefficients  $(\alpha_*, \beta_*)$  sont détaillés dans l'article de référence (Jiang et Weng, 2004),  $(\mu_*, \kappa_*)$  sont les modules élastiques tangents relatifs à chaque phase, et  $\mathcal{L}^c$  le tenseur d'élasticité tangent du composite. Les différents tenseurs impliqués dans les relations (9) se déclinent de la façon suivante

$$\left\{ \begin{array}{l} \bar{B}_{ijkl}^{(*)} = \frac{(\bar{\alpha}_* - \bar{\beta}_*)}{3} \delta_{ij} \delta_{kl} + \bar{\beta}_* \delta_{ijkl} \\ \tilde{b}_{ijkl}^{(*)} = \eta \left\{ 2\mu_* (\tilde{\beta}_* - 1) \delta_{ijkl} + \left[ \kappa_* (\tilde{\alpha}_* - 1) - \frac{2\mu_* (\tilde{\beta}_* - 1)}{3} \right] \delta_{ij} \delta_{kl} \right\} \\ \bar{M}_{ijkl}^{(*)} = \frac{\bar{\beta}_*}{2\mu_*} \delta_{ijkl} + \frac{1}{3} \left( \frac{\bar{\alpha}_*}{3\kappa_*} - \frac{\bar{\beta}_*}{2\kappa_*} \right) \delta_{ij} \delta_{kl} \\ \tilde{m}_{ijkl}^{(*)} = \eta \left\{ \tilde{\beta}_* \delta_{ijkl} + \frac{1}{3} (\tilde{\alpha}_* - \tilde{\beta}_*) \delta_{ij} \delta_{kl} \right\} \\ \eta = \sum_s v_{pq}^{(s)} f_{pq}^{(s)} \end{array} \right. \quad (10)$$

## 3 Résultats et discussion

L'identification des paramètres du modèle a été effectuée par le biais d'un logiciel d'optimisation développé au LPMTM (Castelneau, 2001) en utilisant les essais réalisés par Sanders et al. (1997) sur du cuivre élaboré par condensation et compaction de poudres, de manière à obtenir trois tailles moyennes de grains :  $d=49$  nm, 110 nm et 20000 nm. Les paramètres relatifs à l'épaisseur des joints de grains ( $\delta=1$ nm), aux modules d'Young et aux coefficients de Poisson initiaux du grain ( $E_g=65900$  MPa,  $\nu_g=0,35$ ), du joint de grain ( $E_{gb}=65800$  MPa,  $\nu_{gb}=0,35$ ) et du composite ( $E_c=65850$  MPa,  $\nu_c=0,35$ ) sont ceux utilisés par Jiang et Weng (2004). Les autres paramètres sont quant à eux soumis à une procédure d'identification qui prend en compte simultanément les trois taille de grains et qui donne  $\tau_\infty=105$  MPa,  $k_\sigma=468$  MPa. $\sqrt{\text{nm}}$ ,  $a_\sigma=-23,13$  MPa. $\sqrt{\text{nm}}$ ,  $n_{gb}=0,4$ ,  $\sigma_y=137$  MPa et  $h_{gb}=546$  MPa.

Les résultats de cette identification à partir des essais de traction de Sanders et al. (1997) sont reportées en figure 2. On constate tout d'abord un accord satisfaisant entre notre modélisation et les mesures expérimentales sur une large gamme de déformation. Nous noterons que des calculs ont été effectués en utilisant différents pas de temps pour le chargement macroscopique, de manière à être sûr quant aux résultats numériques du modèle.

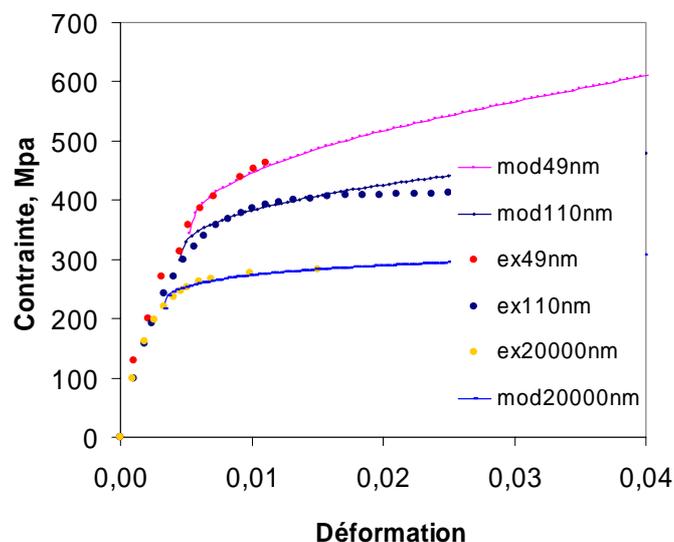


FIG. 2 – Résultats du modèle (mod) et de Sander et al. (1997) (ex)

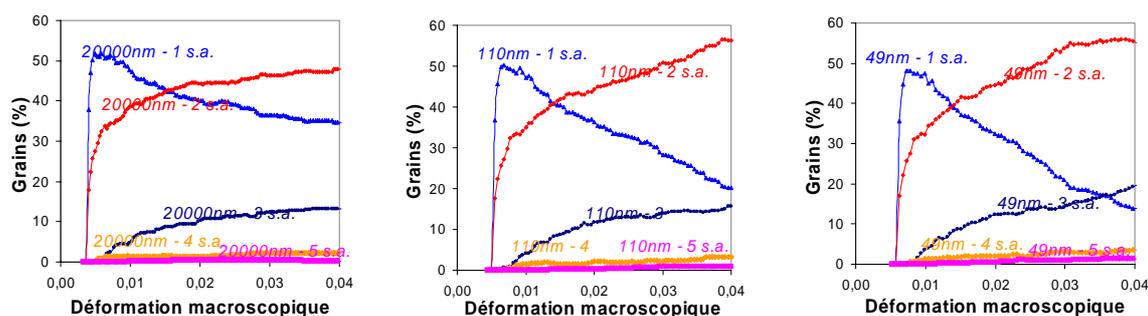


FIG. 3 – Influence de la taille des grains sur l'activation des systèmes de glissement.

La plasticité du matériau cristallin est caractérisée par l'activation des systèmes de glissement dans les grains. La figure 3 représente la variation du pourcentage de grains ayant plastifié, avec 1, 2, ...5 systèmes de glissement, en fonction de la déformation macroscopique. On montre que la majorité des grains accommodent la déformation avec moins de 5 systèmes de glissement, et ceci quelque soit la taille des grains. Cependant, le % des grains se déformant avec un seul système de glissement diminue en fonction de la déformation macroscopique plus rapidement lorsque la taille des grains devient plus faible. Dans le même temps, le % de grains se déformant avec 2 systèmes de glissement augmente régulièrement, de telle sorte pour les grains ultrafins, à une déformation macroscopique de l'ordre de 2%, il y a autant de grains qui se déforment avec un ou 2 systèmes de glissement. Ce comportement très important permet d'expliquer certaines observations expérimentales.

Ce modèle est jugé suffisamment pertinent pour être appliquée à nos matériaux, élaborés par compaction isostatique à chaud (Billard, 2004 ; Billard et al., 2006) de nanopoudres métalliques. Comparativement au modèle de référence, le modèle incrémental offre la possibilité de décrire la réponse globale du matériau sur une plage de déformation bien plus importante.

## References

Billard, S. 2004 Elaboration et caractérisation de matériaux nanocristallins obtenus par compaction isostatique à chaud Thèse de Doctorat Université Paris 13.

Billard, S., Fondère, J.P. Bacroix, B. Dirras, G.F. 2006 Macroscopic and microscopic aspects of the deformation and fractures mechanisms of ultrafine-grained aluminum processed by hot isostatic pressing. *Acta Materialia* **54**, 411-421.

Castelneau, O. 2003 Minimisation de fonctions et optimisation de paramètres avec Pikatchou, LPMTM-CNRS, Villetaneuse.

Christensen, R.M., Lo, K.H. 1979 Solution for the effective shear properties in three phase sphere and cylinder models. *J. Mech. Phys. Solids*. **27**, 315-330.

Hall, E.O., 1951 Proc. Phys. Soc. London. B-64: p. 747-753.

Jiang, B., Weng, G.J. 2004 A generalized self consistent polycrystal model for the yield strength of nanocrystalline materials. *J. Mech. Phys. Solids*. **52**, 1125-1149.

Luo, H.A., Weng, G.J. 1987 On Eshelby's inclusion problem in a three phase spherically concentric solid, and a modification of Mori-Tanaka's method. *Mechanics of Materials*. **6**, 347-361

Petch, N.J., J. 1953 Iron Steel Inst. 174: p. 25-28.

Sanders, P.G., Eastman, J.A., Weertman, J.R. 1997 Elastic and tensile behaviour of nanocrystalline copper and palladium. *Acta mater*. **45**, 4019-4025.