



**HAL**  
open science

# Simulations des dislocations : de l'échelle atomique à la microstructure

G. Monnet

► **To cite this version:**

G. Monnet. Simulations des dislocations : de l'échelle atomique à la microstructure. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Université Paris 13, 2010. tel-01834240

**HAL Id: tel-01834240**

**<https://edf.hal.science/tel-01834240>**

Submitted on 10 Jul 2018

**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.

Public Domain

**Mémoire d'Habilitation à Diriger des Recherches**  
**Université de Paris 13**

**Date de soutenance : 5 juillet 2010**

**Simulations des dislocations :  
de l'échelle atomique à la  
microstructure**

**Ghiath Monnet**  
**EDF-R&D, MMC**

Le jury est composé :

- 1) **Yves Bréchet**, SIMAP, INPG : **examineur**
- 2) **Patrick Cordier**, Unité Matér. Trans., Université Lille1 : **rapporteur**
- 3) **Guy Dirras**, LPMTM, Université Paris 13 : **examineur**
- 4) **Samuel Forest**, Centre des Matériaux, Mines Paris : **examineur**
- 5) **Patrick Franciosi**, LPMTM, Université Paris 13 : **examineur**
- 6) **Ladislav Kubin**, LEM, CNRS-ONERA : **examineur**
- 7) **François Louchet**, LGGE, Université de Grenoble I : **rapporteur**
- 8) **Laurent Pizzagalli**, PhyMat, Université de Poitiers, **rapporteur**



*à Jaber ISMAIL*



## Avant-propos

Dans ce mémoire, je présente une vision synthétique de résultats récents obtenus dans le cadre des simulations multi-échelles du comportement mécanique couvrant différents aspects. Par souci de cohérence thématique, je me contenterai de présenter les études réalisées pour la compréhension des mécanismes de plasticité dans le fer et les aciers des cuves des centrales nucléaires de type Réacteurs à Eau Pressurisée (REP). Ainsi, l'activité de recherche associée à ma thèse et au poste d'ATER ne sera pas ici considérée. Elle a porté sur la caractérisation de la microstructure de dislocations par analyses d'élargissement [1] et d'asymétrie [2,3] de profils de diffraction et sur l'étude de l'effet de l'énergie stockée sur les mécanismes de la recristallisation statique [4]. Ma recherche post-doctorale a quant à elle concerné l'étude des mécanismes de la plasticité dans le zirconium [5] par simulations de dynamique des dislocations et au durcissement provoqué par les précipités de niobium dans les alliages Zr-1% Nb [6]. Enfin, j'ai préféré ne pas intégrer dans ce mémoire mes travaux en cours sur la germination des dislocations aux surfaces libres, le comportement des alliages austénitiques Fe-Ni, l'effet du carbone interstitiel sur la mobilité des dislocations et l'étude expérimentale du comportement mécanique des monocristaux de fer.

Mes activités ont lieu à EDF – R&D au Département de Matériaux et Mécanique des Composants (MMC) sur le site des Renardières à Moret sur Loing dans la région parisienne. Elles se sont déroulées, pour la plupart, dans le cadre de projets intégrés européens (SIRENA, PERFECT, PERFOMR 60), dédiés aux simulations multi-échelles du dommage d'irradiation. Par ailleurs, les résultats obtenus sont souvent le fruit de nombreuses collaborations avec plusieurs collègues que je tiens ici à remercier chaleureusement pour leurs implication : Christophe Domain (EDF-R&D), Benoit Devincere, (LEM, CNRS-ONERA), Dmitry Terentyev, (SCK-CEN, Belgique), David Bacon (University of Liverpool), Yuri Osetsky (ORNL, Etats-Unis), Patrick Franciosi (LMPTM, Université Paris 13), Sylvain Queyreau et Sanae Naamane (doctorants). Par conséquent, j'emploierai la première personne du pluriel tout au long de ce texte afin de souligner le caractère collectif de *nos* travaux.

Enfin, dans le respect de l'exercice ici réalisé, j'ai évité de submerger le lecteur de détails d'ordre technique lorsque ceux-ci n'étaient pas indispensables à la compréhension générale. Tous ces détails se retrouvent cependant dans les publications citées. L'idée est avant tout de se concentrer sur la discussion scientifique autour des résultats afin de stimuler les débats.



## Remerciements

Au-delà des contraintes personnelles et professionnelles, le diplôme d'habilitation à diriger des recherches représente un aboutissement, la confirmation d'une vocation. Outre un goût prononcé pour la recherche et une attitude quasi obsessionnelle face aux interrogations scientifiques, le chercheur doit pouvoir bénéficier d'un ensemble de conditions lui permettant de s'épanouir dans sa quête de connaissances, de stabiliser son parcours et de rendre crédible ses perspectives de recherche à long terme.

En milieu industriel, un tel parcours académique est plutôt rare et doit être solidement soutenu par la hiérarchie, ce qui s'avère particulièrement atypique compte tenu des objectifs avant tout concrets. Une telle configuration existe justement au sein de la section Recherche & Développement d'EDF, dans le but ultime de prédire la durée de vie des centrales nucléaires de deuxième génération, qui représentent la majeure partie du parc nucléaire français.

Tout au long de mon travail à EDF-R&D, j'ai eu la chance d'avoir des responsables dont la totale confiance m'a permis de définir librement mes objectifs de recherche, d'évaluer mes besoins et de m'accorder le temps nécessaire. Ce "climat" de liberté scientifique, je le dois beaucoup à Jean-Michel Frund et Jean-Paul Massoud, ancien et actuel chefs du groupe Métallurgie du Département Matériaux et Mécanique des Composants (MMC). L'ambiance chaleureuse et amicale qu'ils ont su installer dans notre groupe, la confiance et la solidarité qu'ils ont établies, ont transformé mon travail en un véritable plaisir quotidien.

Bien évidemment, il y a surtout *le* collègue de bureau, celui qu'on salut tous les matins et qui partage nos soucis, déboires et gloires. J'ai eu beaucoup de chance que ce collègue soit Christophe Domain. D'abord parce que je n'ai pas réussi (encore) à l'agacer ou à l'irriter, malgré mon tempérament franc et entier. Ensuite, Christophe possède une grande curiosité et une compétence technique et scientifique remarquable, faisant de lui le collègue de travail idéal. Il se trouve qu'il est également le chef de notre laboratoire de Simulations des Matériaux. Malgré une épuisante charge de travail, Christophe a toujours fait preuve d'une rare disponibilité et amabilité pour résoudre les problèmes du quotidien.

Je voudrais également remercier Benoît Devindre du Laboratoire d'Etudes des Microstructures (CNRS-ONERA), le collègue universitaire qui m'a accompagné dans l'encadrement des doctorants. Il a toujours su apporter, quand il fallait, le grain de sérénité nécessaire au déroulement de ces thèses. Plus encore, je le remercie pour l'ensemble de notre longue et solide collaboration.

Malgré le formidable écart entre nos domaines de travail, mon amie Magali Watteaux s'est désignée volontaire pour la relecture de ce mémoire. Je la remercie infiniment d'avoir eu le courage de se plonger dans ce texte ardu, dénué de toute poésie et si éloigné de ses spatio-temporalités archéogéographiques.





# Table des matières

<b>1. Introduction</b>	<b>11</b>
<hr/>	
<b>2. Simulations des dislocations à l'échelle atomique</b>	<b>15</b>
2.1. Simulations <i>ab initio</i>	15
2.2. Considérations sur les conditions des simulations SM et DM	16
2.3. Structure de cœur des dislocations	18
2.4. Énergie des dislocations	20
2.5. Mesures de la friction de réseau	21
<hr/>	
<b>3. Méthodes de transition d'échelles</b>	<b>25</b>
3.1. Le bilan énergétique d'une simulation SM	25
3.2. Une nouvelle définition de dureté d'obstacle	27
3.3. Méthode d'analyses de l'activation thermique	29
3.4. Application au mécanisme de Peierls	34
3.5. Énergie d'activation pour le désancrage des cavités	40
<hr/>	
<b>4. Simulations de dynamique des dislocations</b>	<b>45</b>
4.1. Bref historique de la dynamique des dislocations	46
4.2. Anisotropie et simulations DD	46
4.3. Lois de mobilité	47
4.4. Durcissement de la forêt dans le régime athermique	49
4.5. Durcissement d'Orowan dans le régime athermique	59
4.6. Durcissement d'Orowan dans le régime thermique	62
4.7. Durcissement par les cavités	71
<hr/>	
<b>5. Discussion et conclusions</b>	<b>77</b>
5.1. Friction du réseau dans le fer	77
5.2. Interaction avec les cavités	79
5.3. Mécanisme d'Orowan à basse température	79
5.4. Pour résumer	80
5.5. Beaucoup de choses restent à faire ...	81
5.6. Perspectives de recherches	82
<hr/>	
<b>6. Références</b>	<b>85</b>

Articles associés au mémoire



## 1. Introduction

Il n'est pas nécessaire d'appréhender les mécanismes de la plasticité pour procéder à l'élaboration d'alliages en métallurgie. Les anciennes civilisations n'ont pas attendu les scientifiques pour élaborer et utiliser le bronze ou le fer. La démarche empirique est suffisante et a prouvé son efficacité à travers les siècles. En revanche, lorsqu'il s'agit de *prédire* le comportement mécanique dans des conditions inhabituelles, la compréhension de ces mécanismes devient obligatoire. C'est précisément le cas pour les aciers des cuves des centrales nucléaires, soumis à une forte dose d'irradiation [7]. Leur tenue mécanique constitue une des conditions de sûreté les plus contraignantes. Ils sont de structure Cubique-Centree (CC), se caractérisent par une microstructure bainitique complexe [8], sont non texturés et constitués de différentes composantes : carbures intergranulaires, intra- et inter-lattes, paquets de lattes dans les anciens grains austénitiques. En outre, l'irradiation conduit à la formation d'une large densité de défauts cristallins (ponctuels, boucles de dislocations, précipités, tétraèdres de faute d'empilement, cavités, etc.) ancrant fortement les dislocations. L'irradiation conduit au durcissement et à la fragilisation. La question primordiale qui se pose à nous est donc celle-ci : comment construire une chaîne de connaissances permettant d'appréhender les différentes facettes du comportement mécanique de ces matériaux ?

Longtemps, toutes les tentatives pour expliquer les effets d'irradiation étaient fondées exclusivement sur les observations expérimentales. Ces observations comportent beaucoup de lacunes en raison des limites de fonctionnement des instruments. Par exemple, la taille minimale des défauts visibles en Microscopie Électronique à Transmission (MET) est de l'ordre de 1-2 nm, ce qui laisse croire que beaucoup de défauts d'irradiation restent invisibles expérimentalement. Par ailleurs, de nombreuses techniques d'observation sont indirectes et nécessitent parfois une interprétation discutable des résultats, comme dans la diffraction à petits angles ou l'annihilation de positons, etc. Si nous ajoutons à cela les difficultés intrinsèques à l'étude des matériaux irradiés (difficulté de manipulation et de transport, outils spécifiques dédiés, réglementations de protection, etc.), nous comprenons pourquoi notre compréhension des effets d'irradiation a progressé avec difficulté.

Heureusement, l'essor extraordinaire des moyens de calcul numérique, depuis plus d'une dizaine d'années, a poussé la frontière du possible jusqu'à des horizons inattendus : de la prédiction de l'évolution de la microstructure à l'étude de la plasticité sous irradiation. Désormais, grâce à la technique des simulations de Dynamique Moléculaire (DM), il est possible de simuler à l'*échelle des atomes* les dislocations de différents caractères et leurs interactions avec les autres défauts [9]. La Dynamique des dislocations (DD) permet de simuler l'évolution d'une microstructure de dislocations et de prédire leur comportement collectif [10], afin de constituer une loi cristalline directement utilisable dans les simulations aux échelles supérieures [11,12] (Éléments finis et techniques d'homogénéisation).

Les simulations numériques ont conduit à une avancée majeure dans l'étude des matériaux de structure cristallographique CC. Par commodité, l'abréviation CC sera utilisée comme adjectif dans la suite du texte. Non seulement le comportement des matériaux CC est complexe, mais l'élaboration de monocristaux reste une tâche difficile, comparée au cas des matériaux de structure Cubique-à-Faces-Centrees (CFC). En effet, outre les spécificités géométriques propres à la structure CC, la plasticité de ces matériaux se distingue par deux caractéristiques importantes : une forte Énergie de Faute d'Empilement (EFE) sans faute stable et une petite

taille de sites interstitiels (octaédrique et tétraédrique). Ces deux effets confèrent aux dislocations un comportement atypique vis-à-vis des dislocations dans la structure CFC. D'abord, les dislocations CC ont un cœur compact [13,14], ce qui génère une forte friction de réseau [15] et facilite largement le glissement dévié [16]. D'un autre côté, compte tenu de l'importante distorsion du réseau provoquée par les atomes interstitiels [17], les dislocations réagissent fortement avec les impuretés ou les éléments d'alliage en solution solide interstitielle, comme le carbone [18] ; leur solubilité est en effet très limitée. Par ailleurs, la structure CC offre d'autres complications. Contrairement à la structure CFC, et bien que les directions denses soient bien identifiées, les plans de glissement n'appartiennent pas à une famille unique. En plus des plans classiques de type  $\{110\}$ , l'activation des plans  $\{112\}$  ne fait plus de doute [16]. Ceci génère un foisonnement d'interactions entre dislocations appartenant aux 24 systèmes disponibles [19]. L'approche en facteur de Schmid n'est plus valable puisqu'il faut distinguer au moins un facteur par type de système de glissement, voire deux facteurs pour les plans  $\{112\}$  dans le sens du maillage et antimaillage. Le comportement individuel et collectif des dislocations dans les matériaux CC est donc plus complexe que dans les matériaux CFC. Ceci n'a, bien évidemment, pas empêché l'utilisation intensive des matériaux CC dans l'industrie, même si cela n'a pas facilité la tâche des chercheurs.

Pour toutes ces raisons, les simulations numériques ont été d'une grande utilité pour l'étude de la plasticité des matériaux CC. Au départ, ces simulations ont été utilisées comme moyen de compréhension et de description purement qualitative en raison de la faible capacité de calcul et de l'immaturité méthodologique (voir par exemple le problème des potentiels empiriques utilisés par Yamaguchi et Vitek [20]). Ainsi, les résultats n'étaient pas d'une grande précision.

Par ailleurs, pour une raison intrinsèque aux simulations numériques, l'échelle du temps simulé reste étroitement liée à la finesse de la description spatiale. Si nous voulons rendre compte explicitement de la totalité du spectre de vibration atomique, il est illusoire de croire pouvoir simuler des événements rares comme la diffusion. Cette dualité espace-temps est universelle et règne aussi dans le domaine expérimental, même si les intervalles de compatibilité ne sont pas les mêmes. Par exemple, il n'est pas possible d'observer en MET une dislocation se déplaçant à une vitesse de quelque m/s.

Afin de faire face à ces difficultés, une démarche multi-échelles a été mise en place. Même si la signification de cette expression reste encore floue et que son utilisation suit un phénomène de mode, nous nous restreignons ici à la définition suivante : (i) d'abord, à chaque fenêtre de l'espace-temps correspond une technique de simulation et, (ii) les données d'entrée de chaque simulation doivent provenir de l'expérience ou des simulations aux échelles inférieures. Le *label* "multi-échelle" traduit pour nous une condition nécessaire : l'absence totale de tout paramètre ajustable. Le non respect de cette condition retire à cette démarche toute son originalité et sa spécificité.

Parallèlement à la naissance de la démarche multi-échelles, les limitations respectives dans l'espace-temps de chacune des techniques de simulation ont conduit à une impasse : les résultats des simulations à une échelle donnée ne peuvent pas être directement exploités aux échelles supérieures. Par exemple, la sensibilité à la température, caractérisée par les simulations DM ne peut pas être utilisée dans la DD ou comparée aux expériences [13]. D'où la nécessité d'établir une série de méthodes de transition permettant, en intégrant les conditions de simulations, d'interpréter les résultats à une échelle supérieure.

Dans ce mémoire, nous présenterons les résultats obtenus concernant le comportement des dislocations dans le fer et les aciers de cuves. Le premier chapitre sera dédié aux simulations à l'échelle atomique, suivi par un chapitre introduisant les différentes méthodes de transition

que nous avons mises en place. Nous comparons les résultats de ces méthodes, lorsque c'est possible, à ceux issus de l'expérience. Ensuite, dans un troisième chapitre, nous présenterons les résultats des simulations DD, incluant la validation de la démarche multi-échelle et des méthodes de transition. Enfin, nous clôturerons ce mémoire par une discussion, une conclusion générale et une réflexion sur les travaux à venir.

A la fin de ce mémoire, nous pouvons trouver une copie des articles connectés aux sujets abordés et nécessaires pour la précision des détails techniques des simulations. Voici la liste de ces articles :

- 1) *Simulation of screw dislocation motion in iron by molecular dynamics simulations*,  
Domain C., Monnet G, **Phys. Rev. Letters**, 95 (2005) 215506/1-4
- 2) *Structure and mobility of  $1/2\langle 111 \rangle\{112\}$  edge dislocation in iron*,  
Monnet G, Tarentyev D. **Acta Mater.** 57 ( 2009) 1416 –1426
- 3) *Mechanical and energetical analysis of molecular dynamics simulations of dislocation-defect interactions*,  
Monnet G, **Acta Mater.**, 55 (2007) 5081 - 5088
- 4) *Mesoscale thermodynamic analysis of atomic-scale dislocation-obstacle interactions simulated by molecular dynamics*,  
Monnet G, Osetsky Y, Bacon D., **Phil. Mag.**, 90 (2010) 1001
- 5) *Solute friction and forest interaction*,  
Monnet G, Devincere B, **Phil. Mag.**, 86 (2006) 1555 - 1565
- 6) *Investigation of precipitation hardening by dislocation dynamics simulations*,  
Monnet G, **Phil. Mag.**, 86 (2006) 5927 - 5941
- 7) *Atomic and dislocation dynamics simulations of plastic deformation in Reactor Pressure Vessel Steel*,  
Monnet G, Domain C, Devincere B, Queyreau S, **J. Nucl. Mat.** 394 (2009) 174–181
- 8) *Slip systems interactions in  $\alpha$ -iron determined by dislocation dynamics simulations*,  
Queyreau S, Monnet G, Devincere B, **Inter. J. Plasticity**, 25 (2009) 361–377
- 9) *Low temperature deformation in iron studied with dislocation dynamics simulations*,  
Naamane S, Monnet G, Devincere B, **Inter. J. Plasticity**, 26 (2010) 84–92



## 2. Simulations des dislocations à l'échelle atomique

A l'échelle atomique, trois techniques de simulation de dislocations sont disponibles [21] : les simulations *ab initio*, la Statique Moléculaire (SM) et la Dynamique Moléculaire (DM). Les deux dernières sont fondées sur la résolution de la deuxième loi de Newton, la force étant déduite du potentiel empirique interatomique, alors que la méthode *ab initio* résulte de la résolution approchée de l'équation de Schrödinger. Comme précisé dans l'introduction de ce mémoire, je ne rentrerai pas dans les détails de chaque technique. Je me contenterai ici de signaler les résultats et les aspects critiques ou limites de l'utilisation de chaque technique appliquée aux études des dislocations.

### 2.1. Simulations *ab initio*

Cette technique est conçue pour résoudre l'équation de Schrödinger (avec un certain nombre d'hypothèses et d'approximations) pour un ensemble d'atomes, dont les positions des noyaux sont prédéfinies. Pour une revue, on peut consulter [22] pour une présentation générale et [23,24] pour différentes applications matériaux. La solution de cette équation consiste à trouver la densité électronique locale. Tout écart à la solution d'équilibre induit des forces sur les noyaux. Le calcul itératif avec changements de positions de noyaux dans la direction des forces conduit à la prédiction de cet état d'équilibre. Les calculs sont donc essentiellement réalisés à  $T = 0$  K.

Cette technique est gourmande en temps de calcul, de telle sorte que le nombre d'atomes qu'on peut actuellement simuler est de l'ordre de quelques centaines. Ceci implique de sérieuses limitations lorsque les objets simulés sont des dislocations. D'abord, les Conditions Périodiques (CP) dans la direction parallèle à la dislocation sont quasiment obligatoires. Deuxièmement, du fait de la longue portée du champ de distorsion de la dislocation, les conditions aux limites dans les deux autres directions posent toujours un problème dans la mesure où ils ont une influence significative sur les grandeurs mesurées. Plusieurs choix sont alors possibles : les surfaces libres [13], les surfaces colmatées par des atomes légers [25], les surfaces fixes [26,27] et les CP [28]. Dans le dernier cas, la boîte de simulation doit contenir un vecteur de Burgers total nul, ce qui implique l'introduction d'au moins un dipôle de dislocations. Concernant le choix de ces conditions, les avis divergent ; aucun consensus n'existe actuellement.

Sans rentrer dans la polémique qui ne saurait être tranchée dans le cadre de ce mémoire, nous pouvons dire que la seule propriété de dislocations, dont la validité est reconnue, est la prédiction de la structure de cœur dans le cas où sa taille n'excède pas quelques vecteurs de Burgers. Il s'agit d'une condition impossible à atteindre dans les matériaux à faible Énergie de Faute d'Empilement (EFE) où le cœur est tellement étalé qu'une faute d'empilement peut être distinguée à l'intérieur même du cœur. C'est essentiellement le cas des alliages et des éléments métalliques de structure CFC. Mais dans le cas des éléments CC et, dans une moindre mesure, dans le cas de la structure Hexagonale-Compacte (HC), surtout le zirconium et le titane, il est tout à fait possible de caractériser la structure du cœur des dislocations. Ceci est plus aisé pour la dislocation vis, dont le cœur est moins étalé, que pour une dislocation d'autre caractère. Ainsi, compte tenu de toutes ces limitations, très peu d'informations



« quantitatives » sur les dislocations peuvent être fournies par *ab initio*. L'intérêt fondamental de cette technique pour l'étude des dislocations réside plus dans la validation des simulations de Statique Moléculaire (SM) – plus précisément le potentiel interatomique – que dans l'obtention de grandeurs « utiles » aux échelles supérieures.

Prenons l'exemple de la dislocation vis dans le fer. Pendant longtemps, nous avons admis qu'elle possédait un cœur asymétrique étalé en trois branches ou plis (*threefold* en anglais), en raison des prédictions des potentiels atomiques antérieures à 2003, comme celle d'Ackland *et al.* [29]. Mais les récents résultats *ab initio* [13] ont démontré que cette structure n'est pas la plus stable (voir Fig. 1), et ont révélé une structure symétrique à 6 plis (*sixfold*). Ceci a remis en question nombre de résultats [30,31]. L'arrivée d'une deuxième classe de potentiels atomiques [32,33] prédisant la même structure de cœur qu'en *ab initio*, a constitué une révolution dans les simulations DM du fer.

D'abord, les résultats DM avec ces potentiels sont très différents des résultats avec les anciens potentiels [34] ; deuxièmement, le comportement de la dislocation s'est révélé "normal" [13], c'est-à-dire en conformité avec les observations expérimentales : glissement planaire dans les plans  $\{110\}$ , niveaux de contrainte réaliste, etc.

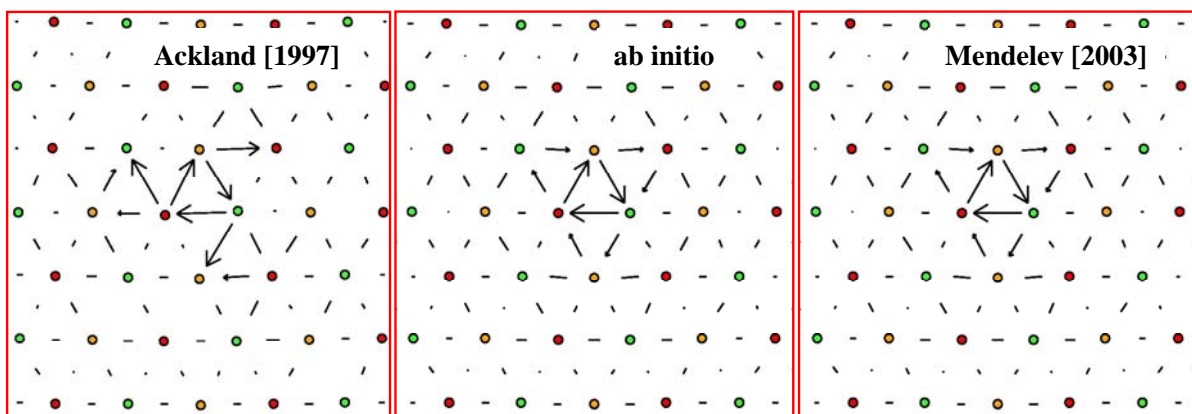


Fig. 1: structure de cœur symbolisée par les flèches de Vitek de la dislocation vis  $\frac{1}{2} [111]$  selon le potentiel empirique d'Ackland *et al* [29], *ab initio* et avec le potentiel de Mendelev *et al.* [13].

Ces différences ne concernent pas seulement la dislocation vis, mais également la dislocation coin, la contrainte de Peierls, la mobilité et la forte friction du réseau sur la dislocation mixte d'orientation  $\langle 110 \rangle$  [35].

Les simulations *ab initio* ont joué un rôle similaire dans la remise en question des structures de cœurs stables dans le silicium, ce qui a permis récemment de découvrir un cœur de transition pour la dislocation mixte dans le silicium [25].

## 2.2. Considérations sur les conditions des simulations SM et DM

La seule et unique donnée nécessaire pour ces simulations est le potentiel empirique interatomique : une fonction dont les variables sont les positions des atomes voisins

(premiers, seconds, voire troisièmes proches voisins). Le gradient de cette fonction fournit tout simplement la force résultante sur l'atome en question. Il y a donc un rayon de coupure au delà duquel les atomes du cristal n'exercent aucune influence sur l'atome considéré. Il ne faut pas en déduire que cette technique s'applique seulement aux phénomènes de courte portée, car l'information se propage à travers les proches voisins. La présence du rayon d'écrantage implique simplement l'absence de corrélations d'ordre supérieur au-delà de ce rayon.

La SM se distingue de la DM par l'absence de vibrations atomiques. Il s'agit d'un algorithme de recherche du minimum d'énergie, c'est-à-dire la recherche d'un *équilibre* statique à 0 K. Ceci entraîne des simplifications considérables dans l'analyse des résultats et dans les conditions de simulation. Un système statique est caractérisé par *un seul* état d'équilibre – micro et macroscopique – pour chaque ensemble de conditions externes. Il n'y a donc pas d'énergie cinétique ni d'entropie associée. La seule grandeur d'état du système est l'énergie potentielle  $E_{pot}$  qui correspond à la totalité de l'énergie interne du système  $U$ .

Bien évidemment, les mécanismes dissipatifs injectent de l'énergie cinétique dans le système. L'originalité de la SM est l'extraction permanente de cette énergie, de telle sorte que le système reste toujours en condition quasi-statique. La dissipation traduit par conséquent la diminution de l'énergie totale et rend inutilisable le principe de conservation d'énergie.

Le bilan énergétique de ce type de simulations a été dressé dans [36]. A chaque itération, selon le premier principe de la thermodynamique, l'énergie interne du système varie :

$$dE = \delta W + \delta Q, \quad (2.1)$$

où  $\delta W$  et  $\delta Q$  symbolisent les différentiels inexacts des échanges de travail et de chaleur avec le milieu externe. Dès lors, il faut distinguer deux catégories de simulations SM : les simulations des transformations réversibles (sans dissipation) et toutes les autres impliquant des évolutions irréversibles du système. Dans le premier cas, il s'agit des études des systèmes à l'équilibre quasi-statique en permanence ( $\delta Q = 0$ ). Notons que cela ne signifie pas forcément l'absence de sollicitation mécanique. Cette catégorie de simulations comprend, par exemple, le cas du chargement élastique. La seule condition à respecter est l'*absence d'irréversibilité tout au long de la simulation*. C'est typiquement le cas des simulations dédiées à l'étude des cœurs des dislocations et de leur énergie [18]. Dans la catégorie comportant des évolutions irréversibles du système, on peut citer les simulations du mouvement des dislocations [13,37] et leurs interactions avec les défauts cristallins [38,39]. Nous exposerons plus tard nos résultats les plus récents dans ce domaine.

Quant à la DM, elle est actuellement la seule technique de simulation à rendre compte explicitement des vibrations atomiques, c'est-à-dire de la température. En reproduisant le spectre des vibrations, elle est en mesure de prédire toutes les fluctuations énergétiques et, ainsi, de reproduire l'activation thermique. Cependant, nous avons montré [13] qu'en raison des conditions de simulation, la DM est loin des conditions expérimentales et que l'activation thermique produite par la DM est de faible intensité. Dans la suite de ce chapitre, nous rappellerons quelques caractéristiques des mécanismes stochastiques et la manière dont les paramètres d'activation peuvent être estimés à partir des simulations DM.

Le chargement en DM peut être effectué selon deux méthodes. Sur les couches atomiques fixes, on peut soit contrôler le déplacement des atomes, soit modifier artificiellement une force résultante sur eux. Cela aboutit aux conditions à déformation imposée [13,37] ou à contrainte imposée [34,30]. En effet, compte tenu de la faible taille du cristal simulé en DM,

si la déformation est imposée, la contrainte calculée fluctue et vice versa. Les avis divergent sur la grandeur à contrôler au niveau de la boîte de simulation.

Nous faisons ici le choix de la déformation imposée afin de simuler les essais mécaniques, généralement réalisés à vitesse de déformation constante. La contrainte calculée à chaque itération est, ensuite, moyennée sur un grand nombre de pas, comparé au nombre de pas nécessaires pour échantillonner une vibration atomique proche de la fréquence de Debye.

### 2.3. Structure de cœur des dislocations

Des propriétés importantes de la dislocation, comme la friction du réseau, découlent de sa structure de cœur. Dans la structure CC, où le cœur est compact, la caractérisation de cette structure est, comme nous venons de le voir, cruciale pour la validation du potentiel atomique empirique..

Le modèle le plus populaire – et parmi les plus élégants intellectuellement – est celui de Peierls [40], revu et corrigé par Nabarro [41]. A peine six ans après la découverte des dislocations en 1934 par Orowan [42], Polani [43] et Taylor [44], la maturité scientifique de ce modèle est tout à fait surprenante. Peierls fut le premier à comprendre que la taille du cœur est le résultat d'un compromis entre la répulsion élastique dans le cœur, tendant à étaler le cœur à l'infini, et la résistance au *misfit* (mot anglais sans équivalent français) des plans atomiques, conduisant à la constriction du cœur vers la dislocation de Volterra à cœur de taille zéro. La deuxième découverte de Peierls est que la contrainte critique (appelée aujourd'hui la contrainte de Peierls) est la conséquence de l'aspect discret du cœur.

La première amélioration significative du modèle a été proposée 28 ans plus tard par Christian et Vitek [45], qui ont utilisé, à la place du potentiel du *misfit* sinusoïdal, la dérivée de l'EFE généralisée. Bulatov et al. [46] furent les premiers à calculer la structure de cœur et son évolution sous chargement en fonction de l'EFE généralisée à trois dimensions dans le Si. Ainsi, ils ont démontré que la valeur calculée de la contrainte de Peierls pour la dislocation vis passe de 1650 à 12,5 GPa, alors que la simulation directe de SM renvoie une valeur de 3.4 GPa. L'origine du facteur 4 entre ce modèle et le résultat direct de la SM n'est toujours pas élucidée. Vraisemblablement, le modèle de Peierls, tel qu'il a été établi initialement, a été développé pour une dislocation dont le plan de glissement était bien identifié. Ce n'est certainement pas le cas des dislocations vis dans les matériaux à haute EFE.

L'activation des plans de glissement  $\{112\}$  est maintenant acceptée par la communauté scientifique. Dans un récent travail [47], nous avons décrit la structure du cœur de la dislocation coin dans les plans  $\{112\}$ . La structure de cœur des dislocations vis et coin dans le plan  $\{110\}$  a déjà été décrite dans la littérature [13,37]. Bien entendu, le vecteur de Burgers est de type  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$  dans tous les cas.

Le choix de l'étude de cette dislocation est motivé par l'absence d'information quantitative sur cette dislocation, alors qu'elle caractérise, dans une certaine mesure, l'activation des plans  $\{112\}$  prouvée expérimentalement [15]. Par ailleurs, ce choix comporte un intérêt heuristique en raison de l'absence de symétrie par rapport aux plans  $\{111\}$ , comme montré dans la Fig. 2(a). Ceci est certainement à l'origine des différences de comportement selon le sens de sollicitation : sens du Maclage (M) et AntiMaclage (AM) dans ces plans.

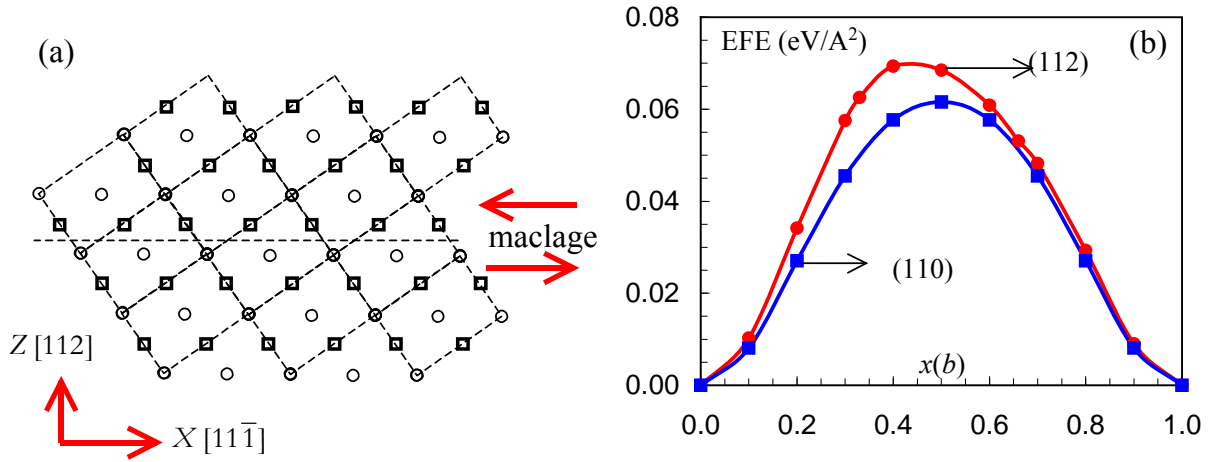


Fig. 2 : (a) projection sur un plan  $\{111\}$  des positions atomiques dans la structure CC. Les carrés et les cercles désignent les positions atomiques dans deux plans  $\{111\}$  successifs ;  
 (b) profil de l'énergie de faute d'empilement généralisée dans la direction du vecteur de Burgers dans les plans  $\{110\}$  et  $\{112\}$ .

Par rapport aux plans  $\{110\}$ , le profil de l'EFE généralisée simulé par *ab initio* [48] dans le plan  $\{112\}$  est donc asymétrique (voir Fig. 2b). Ceci implique également une asymétrie dans la structure de cœur, comme l'ont suggéré Yamaguchi et Vitek [49,50]. Notre analyse personnelle du déplacement nous a appris que, contrairement à l'hypothèse initiale du modèle de Peierls, les déplacements atomiques en-dessous et au-dessus du plan de glissement ne sont pas égaux en valeur absolue. Le champ de déformation de la dislocation n'est donc pas accommodé de la même manière de part et d'autre du plan (voir Fig. 3(a)).

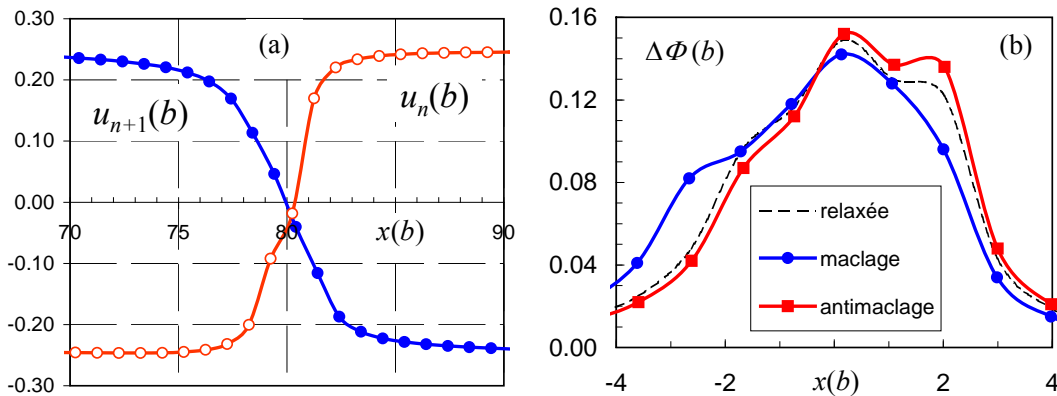


Fig. 3 : (a) profils de déplacement de part et d'autre du plan de glissement; (b) évolution de la structure de cœur (*misfit*) sous chargement de 600 MPa dans les deux sens.

Deuxièmement, lors de l'application d'un chargement, ici de 600 MPa, le déplacement du cœur n'est pas uniforme ni dans un sens ni dans l'autre, comme on le voit dans la Fig. 3(b). Or ces deux points sont au fondement même du modèle de Peierls.

Par ailleurs, par rapport à la structure relaxée, le chargement dans le sens M à 600 MPa provoque indéniablement une augmentation de l'étalement du cœur, alors que, dans le sens AM, le chargement ne semble pas avoir d'effet sur la taille du cœur (voir Fig. 3-b). Il est

intéressant de signaler que dans le modèle initial, le cœur ne doit pas changer de taille sous chargement. Dans le cas où le profil de l'EFE généralisée n'est pas symétrique, aucune des hypothèses de base du modèle ne semble alors se vérifier.

## 2.4. Énergie des dislocations

Une fois la structure de cœur déterminée, nous pouvons explorer les propriétés à longue portée, notamment, l'énergie élastique par unité de longueur de la dislocation dans un cylindre de rayon  $R$ , axé sur sa ligne. Cette énergie est montrée dans la Fig. 4 (a) et comparée à celle de la dislocation coin  $\{110\}$  et vis dans la Fig. 4 (b).

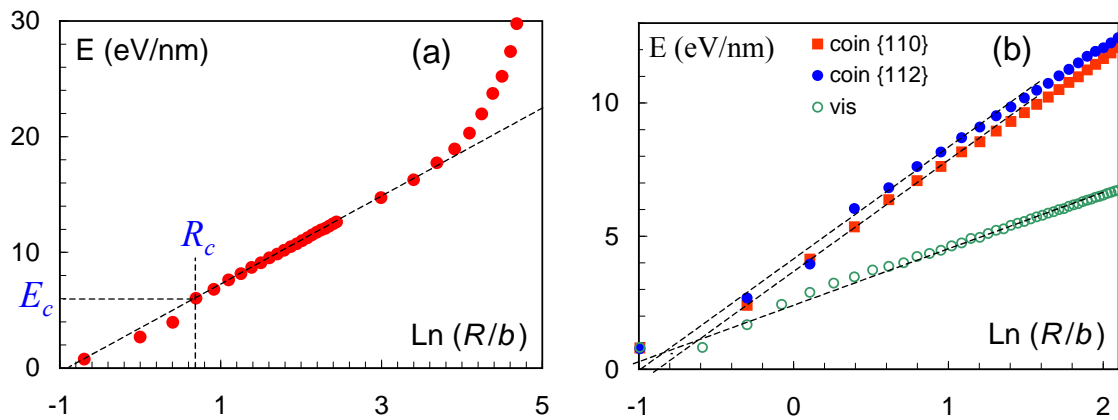


Fig. 4 : l'énergie élastique par nm contenue dans un cylindre de rayon  $R$  : (a) dislocation coin dans le plan  $\{112\}$ , (b) comparaison avec les dislocations vis et coin dans le plan  $\{110\}$ .

Nous pouvons facilement constater deux écarts à la linéarité dans l'échelle logarithmique : pour les rayons faibles  $R < R_c$  et les rayons élevés lorsque  $R$  devient du même ordre de grandeur que la taille du cristal périodique. Le premier écart est connu et lié aux fortes déformations associées généralement au cœur de la dislocation (d'où l'indice « c » dans  $R_c$ ), ce qui délimite la description élastique de la dislocation de Volterra. Quant au deuxième écart, il est difficile à quantifier proprement. D'une part, lorsque la taille du cylindre s'approche de la taille du cristal, l'addition des champs élastiques des images périodiques de la dislocation amplifie significativement l'énergie calculée et, d'autre part, la restriction du mouvement des atomes dans les couches fixes [47] ne permet pas une relaxation totale, contribuant ainsi à une augmentation supplémentaire de l'énergie. L'énergie associée au cylindre de rayon  $R_c$  correspond naturellement à l'énergie du cœur  $E_c$ , qui s'élève à environ 6 eV/nm pour la dislocation coin dans le plan  $\{112\}$ . Pour des valeurs de  $R > R_c$ , l'énergie de la dislocation  $E$  dans un milieu élastique isotrope s'obtient en ajoutant l'énergie élastique et celle du cœur :

$$E = E_c + \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{R_c} \quad (2.2)$$

Notons que si l'on veut, par souci de simplicité, exprimer  $E$  sans la constante  $E_c$ , nous devons remplacer  $R_c$  dans l'équation (2.2) par  $r_o$  :

$$r_o = R_o \exp\left(-4\pi(1-\nu)\frac{E_c}{\mu b^2}\right), \quad (2.3)$$

$r_o$  est appelé le rayon de coupure inférieure ; il n'a pas de signification physique. Il permet uniquement de simplifier l'expression de l'énergie, à ne pas confondre, donc, avec le rayon de cœur  $R_c$ . Dans l'équation 2.3, l'évaluation par excès du point  $(R_c, E_c)$  sur la courbe dans la Fig. 4(b) n'entraîne pas d'erreur dans l'évaluation de  $r_o$ . L'inverse n'est pas correct. La détermination de  $r_o$ , n'est possible que grâce aux simulations atomiques. Nous observons ici une des contributions fondamentales de ces simulations atomiques : lorsque l'élasticité n'est plus valable, seules les simulations atomiques peuvent fournir une réponse directe, dans la limite de validité du potentiel interatomique.

La Fig. 4 (b) nous renseigne sur un autre aspect : l'énergie de la dislocation coin dans le plan  $\{112\}$  est supérieure à celle contenue dans le plan  $\{110\}$  d'environ 6 %. Cette différence provient essentiellement de l'écart des énergies de cœur des deux dislocations, donc indétectable par l'élasticité. Bien que cela ne puisse pas nous renseigner directement sur l'activité des systèmes de glissement associés, nous pouvons quand même prédire que la courbure d'une dislocation coin dans un plan  $\{112\}$  est plus difficile que dans un plan  $\{110\}$ . Puisque le franchissement des obstacles entraîne toujours une courbure de la dislocation, plus au moins marquée, nous pouvons conclure qu'un même obstacle sera plus "dur" dans un plan  $\{112\}$  que dans un plan  $\{110\}$ . Serait-ce l'origine des hypothèses attribuant l'inhibition du glissement sur les systèmes  $\{112\}$  à la présence de carbone [51] ou de silicium [52] ?

Le fer se caractérise quant à lui par un facteur d'anisotropie assez élevé :  $a = 2.36$ . Cela pose la question du choix du module de cisaillement  $\mu$  et du coefficient de Poisson  $\nu$ , fréquemment utilisés dans les modèles ainsi que dans les simulations numériques de type dynamique de dislocations (nous reverrons ce point plus loin dans ce mémoire). En utilisant le tenseur des coefficients élastiques  $C_{ijkl}$ , une réponse à cette question a déjà été fournie dans les travaux de Scattergood et Bacon [53,54], qui ont astucieusement remarqué qu'il est toujours possible de définir ces deux modules tout en respectant l'anisotropie du matériau. En adoptant une approche similaire [47], nous pouvons donc identifier des valeurs de  $\mu$  et  $\nu$  qui, cette fois, découlent directement des courbes de la Fig. 4(b). Leurs valeurs ont été calculées et sont proches de  $\mu = 62$  GPa et  $\nu = 0.49$ .

Deux remarques peuvent être formulées concernant ces deux valeurs. Premièrement, la valeur de  $\mu$  est différente du module de cisaillement dans le repère  $[1\bar{1}1](110)$ . Ce dernier est égal à  $\frac{1}{3}(C_{11} - C_{12} + C_{44})$  ce qui donne pour les valeurs de  $C_{11} = 243.4$ ,  $C_{12} = 145$  et  $C_{44} = 116$  GPa délivrées par le potentiel [32], une valeur de  $\mu$  de 71.5 GPa. Deuxièmement, la valeur de  $\nu$  est très proche de la valeur maximale théorique de 0.5 assurant la stabilité de la dislocation coin. En effet, en élasticité isotrope, la tension de ligne, au sens de De Wit [55], est proportionnelle au facteur  $(1 - 2\nu)$ , ce qui rend une dislocation coin instable dans un matériau dont le coefficient de Poisson dépasse 0.5. Nous touchons ici la limite de la description isotrope des champs de distorsion de la dislocation.

## 2.5. Mesures de la friction de réseau

Dans les matériaux CFC, la dislocation est dissociée en partielles et la contrainte de friction est très faible [56,57], alors que, dans les matériaux CC caractérisés par une forte EFE, la friction de réseau est significative et se trouve à l'origine de la forte sensibilité à la

température, observée expérimentalement [15,58]. Des résultats très récents [59] laissent à penser que le cas du Zr et Ti, de structure HCP, est intermédiaire.

Rappelons ici qu'il existe deux modes de mouvement pour une dislocation. En l'absence d'activation thermique à 0 K, la dislocation doit instantanément franchir la vallée de Peierls sur toute sa ligne ; le chargement mécanique étant la seule force motrice. Ce type de mouvement, appelé mouvement rigide, n'a qu'un intérêt heuristique dans la mesure où, dans toutes les conditions expérimentales, ce n'est pas ce mode qui contrôle le mouvement. En effet, dans les années 1950 déjà, les travaux théoriques [60,61] avaient prédit que le glissement de la dislocation s'effectue grâce à la germination et à la propagation des double-décrochements. Avec l'augmentation de la température, la propagation et l'annihilation des décrochements commencent à jouer aussi un rôle important [62,63]. Nous restreignons ici notre étude au cas des basses températures.

Sous une contrainte appliquée donnée  $\tau$  inférieure à la contrainte critique à 0 K, la fluctuation thermique permet à un segment de dislocation de longueur  $l_c$  de franchir la vallée de Peierls tout en formant deux décrochements. Ce mécanisme a été imaginé il y a 47 ans par Seeger [60] dans le but d'interpréter les expériences de friction interne.

Comme nous l'avons vu, le potentiel empirique interatomique de Mendeleev *et al* [32] pour le fer a permis, pour la première fois, de reproduire la structure isotrope du cœur de la dislocation vis prédite par *ab initio*. Ceci nous assure donc de la fiabilité du potentiel dans la simulation des dislocations dans le fer. Nous avons entrepris une vaste étude du mouvement de la dislocation vis et de la dislocation coin dans les plans  $\{112\}$ . Nous présentons ici quelques effets marquants de ces simulations. Le traitement quantitatif de ces résultats se trouve dans le chapitre suivant.

Concernant la dislocation vis, nous avons été les premiers [13] à observer par DM le déplacement de cette dislocation *via* la germination et la propagation de double-décrochement, exactement comme l'avait suggéré Seeger [60] longtemps avant. Nos simulations ont montré que, après un certain temps d'incubation et de tentatives avortées de germination, un double-décrochement se forme d'une manière stable, suivi d'une étape de propagation (voir la Fig. 5).

Nous avons ainsi pu vérifier l'hypothèse de base du modèle théorique, à savoir la prépondérance du temps d'incubation devant celui de propagation. Ce que nous avons appris de nos simulations est que le premier double-décrochement conduit rapidement à un deuxième double-décrochement afin de permettre à la dislocation de se positionner de nouveau dans un triangle stable [64]. Ainsi, chaque événement de germination conduit à deux double-décrochements. Nous reviendrons sur les simulations DM de la dislocation vis dans le chapitre suivant.

Voyons maintenant l'évolution des courbes de chargement pour la dislocation coin. La Fig. 2 montre les courbes obtenues à différentes températures pour un chargement dans les sens de maclage et d'antimaclage. Ce qui est surprenant est la rapidité avec laquelle la contrainte d'écoulement baisse avec la température. Bien que la contrainte de Peierls soit très élevée pour une dislocation coin – 640 MPa dans le sens de maclage et 700 MPa dans le sens d'antimaclage – la contrainte critique devient insignifiante à 200 K. Cela témoigne de la faible hauteur de la barrière énergétique de Peierls.

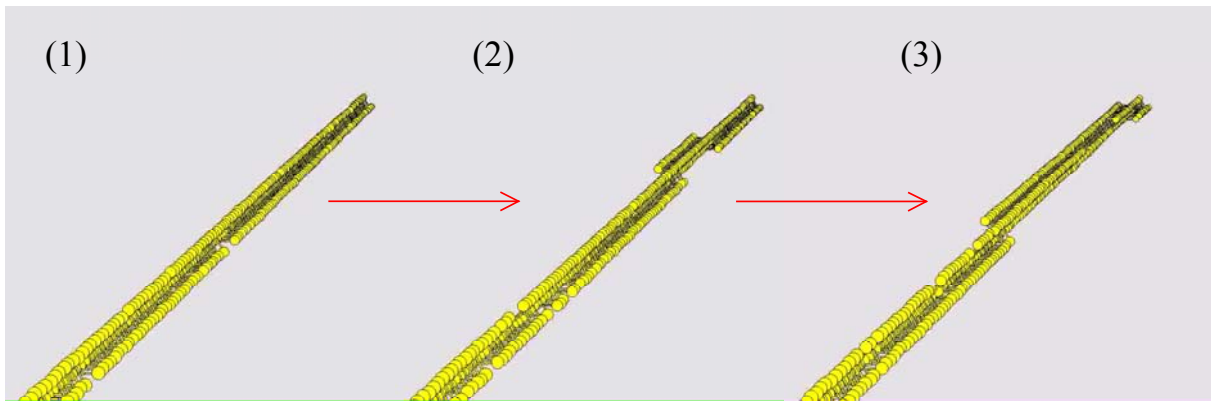


Fig. 5 : succession d'images de la simulation DM montrant le mécanisme de mouvement de la dislocation vis dans un plan de glissement de type  $\{110\}$  à 200 K.

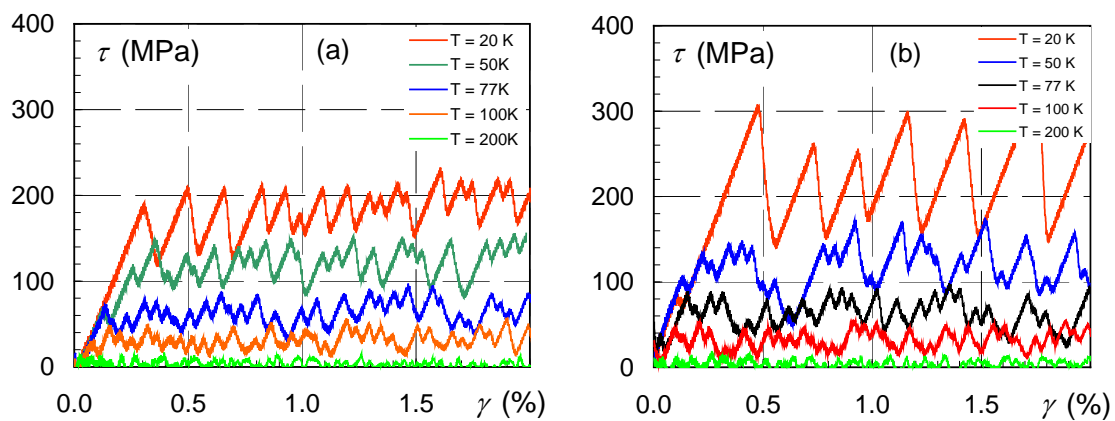


Fig. 6 : courbes de déformation pour une dislocation coin dans le plan  $\{112\}$  dans le sens de maillage (a) et antimaillage (b).

Quelle que soit la température, la contrainte en moyenne reste inférieure dans le sens du maillage. Ceci va dans le sens des observations expérimentales à ce sujet [16,93], sans pour autant les confirmer puisque l'activité de ces systèmes est contrôlée par la mobilité des dislocations vis.

Il est important de noter qu'à partir de telles courbes, on ne peut retirer que des informations d'ordre qualitatif. Une vraie analyse mésoscopique est nécessaire pour réaliser une interprétation quantitative. Dans le chapitre suivant, nous exposons les méthodes de transition mises en place dans le cadre de notre démarche multi-échelle.





### 3. Méthodes de transition d'échelles

A priori, tous les résultats des simulations DM et SM doivent être traités avant d'être utilisés à l'échelle supérieure. Les méthodes présentées ici ne s'appliquent qu'aux cas des simulations à déformation imposée. A notre connaissance, aucun traitement n'a été rapporté dans la littérature concernant les simulations à contrainte imposée.

En l'absence d'activation thermique, nous présentons deux aspects, l'un relié au bilan énergétique lors de l'interaction avec un obstacle local et l'autre permettant de définir la force de l'obstacle. Pour les simulations DM, après un bref rappel théorique de la probabilité d'activation en milieu stochastique, nous expliquons comment les paramètres d'activation peuvent être déduits des simulations DM pour la dislocation vis, la dislocation coin dans les plans  $\{112\}$  et l'interaction entre une dislocation coin et une cavité.

#### 3.1. Le bilan énergétique d'une simulation SM

Dans cette section, nous nous focalisons sur les simulations statiques de l'interaction avec les défauts. Le traitement entier peut être trouvé dans [36]. Nous soulignons ici les points principaux de cette analyse.

Le chargement mécanique de la boîte de simulation contenant une dislocation ancrée, conduit à la courbure de celle-ci. Pour les simulations SM on dispose de: l'énergie potentielle  $E_{pot}$ ; la contrainte calculée sur les couches fixes  $\tau$ ; la déformation totale  $\gamma$  (par l'intermédiaire du déplacement imposé). Dans les articles publiés sur la SM, les auteurs se contentent de présenter ces informations bien qu'aucune ne puisse être transférée à l'échelle supérieure, dans la mesure où elles sont toutes dépendantes des conditions de simulation.

La première analyse mécanique et énergétique a été proposée dans [36], dans laquelle nous avons montré que le travail total par unité de volume  $dW_{tot}$  appliqué pendant une itération de la simulation peut être décomposé en trois quantités: le travail associé à l'accommodation élastique  $dW_{el}$ , le travail contre la friction du réseau  $dW_f$  et le travail contre la tension de ligne  $dW_{il}$ , nécessaire à la courbure de la dislocation:

$$dW_{tot} = dW_{el} + dW_f + dW_{il} = \tau(d\tau/\mu) + \tau_f(d\gamma - d\tau/\mu) + (\tau - \tau_f)(d\gamma - d\tau/\mu), \quad (3.1)$$

où  $d\gamma$  est l'incrément de cisaillement appliqué. La composante élastique et celle de la tension de ligne contribuent à l'augmentation de l'énergie interne et sont réversibles. Quant à la composante  $dW_f$ , elle est irréversible et se transforme en chaleur évacuée du système. Nous avons appliqué notre analyse à l'interaction avec une cavité de 2 nm [36] et 1 nm [65].

Grâce à cette décomposition, nous avons prouvé, pour les faibles courbures et pour la première fois par simulations atomiques, la validité du modèle de Tension de Ligne (TL) dans la prédiction de l'énergie nécessaire à la courbure de la dislocation. L'énergie constante associée à cette TL est de l'ordre de grandeur de l'énergie de cœur de la dislocation, i.e. d'environ 7 eV/nm. En d'autres termes, la courbure de la dislocation n'entraîne pas un changement significatif de l'énergie *élastique* de cette dislocation. Ceci semble s'appliquer dans les deux simulations avec les différentes cavités. Néanmoins, nous ignorons pour le

moment si ce résultat est général ou, tout simplement, la conséquence directe de la faible taille de la boîte de simulations. Comme nous l'avons vu dans la section précédente, l'énergie totale de la dislocation n'est pas donnée par l'équation 2.2 (voir Fig. 4-a). Probablement, la valeur de 7 eV/nm ne correspond à l'énergie de cœur que par « coïncidence ». Cette question importante de la théorie des dislocations ne pourra être résolue qu'avec d'autres simulations impliquant différentes tailles du cristal et différentes conditions aux limites.

Parallèlement à cette analyse en termes de composantes du travail appliqué, nous pouvons effectuer une analyse similaire de l'énergie potentielle du système, également donnée par les simulations SM. Comme cette énergie, le travail élastique et la friction du réseau sont connus, et le bilan énergétique nous permet de déduire l'énergie d'interaction au cours de la phase réversible du chargement [36] :

$$E_{int} = E_{pot} - E_{el} - E_{curv} \quad (3.2)$$

L'équation 3.2 se déduit en supprimant l'énergie dissipée du bilan, puisque le principe des simulations SM revient à évacuer l'énergie cinétique des atomes. Les différentes composantes sont montrées dans la Fig. 7 pour les deux cavités.

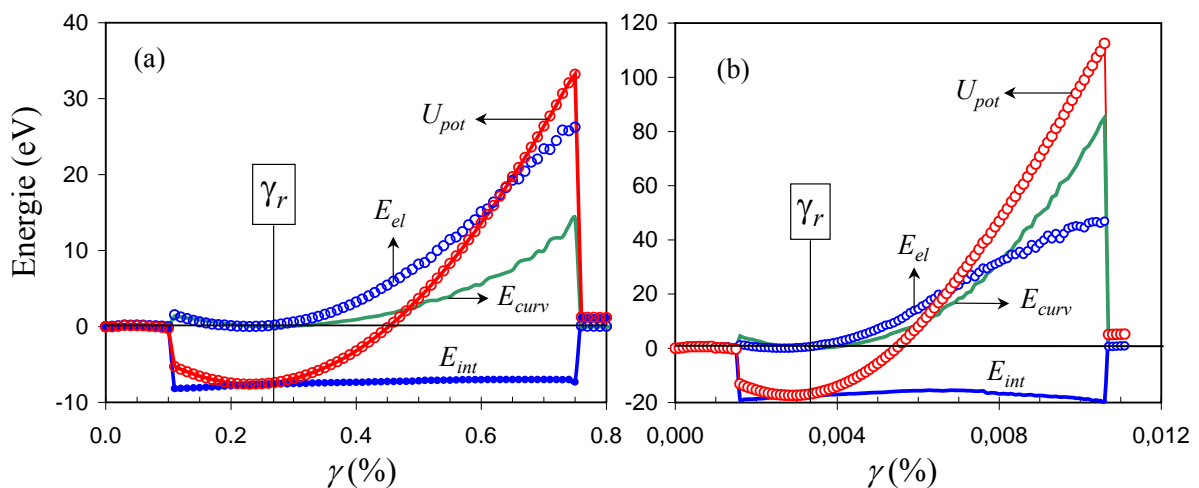


Fig. 7 : évolution des différentes composantes du travail et de l'énergie du système pour une cavité de (a) 1 nm et (b) 2 nm.

Ce qui résulte de ces analyses est que l'énergie d'interaction au cours du chargement est relativement constante et ceci malgré la grande variation de l'énergie potentielle et de la cission. En comparaison, l'énergie d'interaction avec la cavité de 2 nm est presque deux fois supérieure à celle de la cavité de 1 nm. Bien que les deux simulations aient été réalisées avec différentes conditions de simulation, l'énergie d'interaction semble donc être une véritable caractéristique de l'interaction, indépendante des conditions de simulation.

Par ailleurs, nous avons montré que cette énergie correspond environ à l'énergie de la dislocation contenue dans la cavité et qui a été évacuée du système pour maintenir la température à 0 K. En revanche, l'origine de la faible, mais mesurable (voir Fig. 7), variation de l'énergie d'interaction reste encore inconnue. Le bilan énergétique confirme que l'augmentation finale de l'énergie potentielle correspond seulement à l'énergie des deux marches de surface générées par le passage de la dislocation. Ceci indique que l'absorption

des lacunes de la cavité par le cœur de la dislocation ne conduit pas à un changement significatif de l'énergie du système.

Nous avons donc ici un exemple de traitements des résultats des simulations atomiques permettant de déduire des paramètres intrinsèques de l'interaction, indépendants des conditions de simulations.

### 3.2. Une nouvelle définition de dureté d'obstacle

Récemment [65], nous avons montré que les simulations SM peuvent être utilisées pour fournir une description alternative de la force d'obstacle. Dans la Fig. 8(a), nous présentons le schéma à l'origine de la définition classique de la force d'obstacle  $\vec{F}$ . Elle a été conçue pour décrire l'interaction avec un obstacle ponctuel et résulte de la courbure de la dislocation autour de cet obstacle. Cette description souffre de plusieurs inconvénients : (i) la courbure de la dislocation au voisinage de l'obstacle n'est pas constante, (ii) tous les obstacles ont une taille finie, même s'ils sont de nature atomique, (iii) la tension de ligne dépend fortement du caractère local du segment ce qui est, en pratique, difficile à prendre en compte. Même si cette dépendance est bien considérée, en plus de l'énergie  $E$  et de son second dérivatif  $E''$ , il faut aussi intégrer le premier dérivatif  $E'$  qui génère un couple de torsion sur le segment [66,67]. La force nette n'est donc pas parallèle en général à la dislocation. Enfin, la description en matière de *force* n'est pas appropriée dans la démarche multi-échelle, dans la mesure où il est difficile de l'incorporer dans les simulations DD.

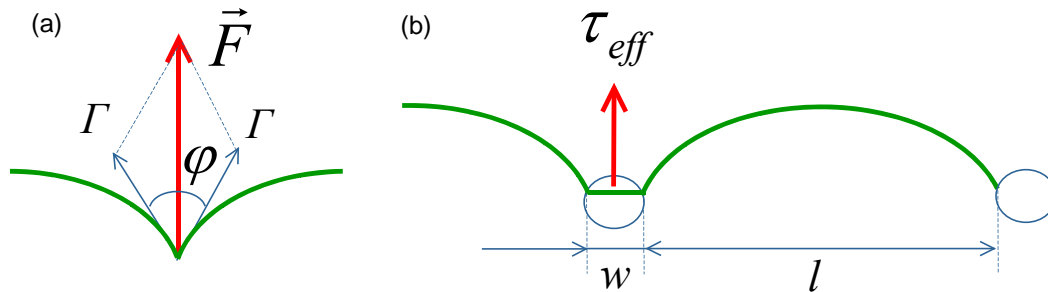


Fig. 8: (a) définition classique de la force d'obstacle ;  
(b) définition alternative fondée sur le concept d'une contrainte maximale.

Face à ces difficultés, comment pouvons-nous utiliser la SM pour définir une force intrinsèque de l'obstacle, c'est-à-dire indépendante des conditions de simulation ? Nous avons tenté de répondre à cette question dans un récent travail [65] par une description alternative schématisée par la Fig. 8(b). En effet, l'utilisation des conditions périodiques induit une périodicité le long de la ligne. Si la taille de l'obstacle est de  $w$  et l'espacement  $l$ , quel que soit l'état de chargement en équilibre, l'obstacle doit supporter une force nette de  $bl(\tau - \tau_f)$ , ou  $\tau_f$  est la friction du réseau. En plus de cette force, la contrainte appliquée génère directement une force sur l'obstacle de  $bw\tau$ . Le désancrage intervient lorsque la somme de ces deux forces (avec  $\tau = \tau_{max}$ ) dépasse la résistance de l'obstacle  $bw\tau_c$ . Nous avons donc :

$$\tau_c = \left(1 + \frac{l}{w}\right) \tau_{max} - \frac{l}{w} \tau_f. \quad (3.3)$$

Notons que, dans la plupart des cas,  $l \gg w$ , ce qui permet de simplifier l'équation précédente :

$$\tau_c = \frac{l}{w} (\tau_{max} - \tau_f). \quad (3.4)$$

Dans l'établissement de l'équation 3.3, la friction du réseau est considérée identique pour tous les caractères le long de la dislocation courbée. Si cette condition n'est pas vérifiée, l'équilibre mécanique ne peut plus être décrit par l'équation 3.3. Ainsi, ce type de raisonnement ne s'applique pas dans le cas des dislocations initialement de caractère vis, ou lorsque la courbure de la dislocation, initialement coin, conduit à la formation d'un segment vis.

La valeur de  $\tau_c$  peut être utilisée comme un critère empirique de désancrage dans les simulations DD [6]. Mais  $\tau_c$  peut avoir une véritable signification physique si elle représente une propriété intrinsèque de l'interaction. Autrement dit, si elle est indépendante de la taille de l'obstacle. Elle doit aussi être indépendante des conditions de simulation, comme la longueur de la dislocation ou les dimensions de la boîte de simulation SM. Dans la Fig. 9 nous avons tracé  $(\tau_{max} - \tau_f)$  en fonction du facteur  $w/l$ . pour deux natures d'obstacle différentes : les cavités (en symboles pleins) et les précipités de cuivre (en rectangles vides).

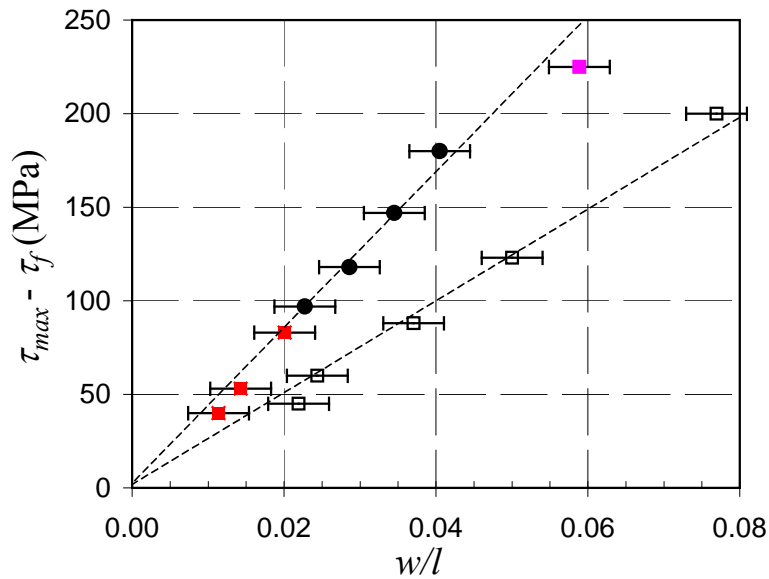


Fig. 9: évaluation de la contrainte critique des cavités (symboles pleins) et précipités de cuivre (symboles vides). Les cercles et rectangles renvoient à différentes conditions de simulations SM.

Comme nous pouvons le constater sur cette figure, les points s'alignent sur deux droites distinctes en fonction de la nature de l'obstacle. La pente de chaque droite fournit la valeur de la contrainte critique de chaque type d'obstacle. Cet alignement prouve que la contrainte critique est la même pour les différentes tailles d'obstacle et de dislocation. Les deux valeurs associées sont : 4.2 GPa pour les cavités et 2.3 GPa pour les précipités de cuivre. Ainsi, pour une taille identique, une cavité est presque deux fois plus "dure" qu'un précipité de cuivre CC dans le fer.

L'origine physique de cette résistance réside dans le résultat de l'interaction. D'une part, une marche de surface est formée lors de la "sortie" du segment de la dislocation de la cavité, tandis que, dans le cas des précipités, il suffit pour la dislocation de surmonter la résistance de cisaillement du cuivre CC. Dans les deux cas, l'interaction est de nature purement atomique, difficile à "deviner" par les approches classiques de l'élasticité. Nous approchons ici un des avantages clés des simulations atomiques dans la description directe et complète des interactions complexes. Toute la question est de savoir comment en extraire les quantités caractéristiques, utilisables à une échelle supérieure. La détermination de  $\tau_c$ , telle qu'elle est présentée ici, en est un exemple.

### 3.3. Méthode d'analyses de l'activation thermique

#### 3.3.1. Contrainte effective dans les simulations atomiques

Dans le cas où la dislocation réagit avec un obstacle local, le chargement conduisant au désancrage force la dislocation à se courber. Dans ce cas, la courbure conduit à la concentration sur  $le$  segment en contact avec l'obstacle de la somme de toutes les forces appliquées sur la dislocation. La contrainte locale, appelée contrainte effective, est par conséquent beaucoup plus élevée que la contrainte appliquée. Cette contrainte joue le rôle de force motrice dans le désancrage.

Par ailleurs, la présence d'une surface libre dans les simulations induit une force d'attraction sur la dislocation [68]. Afin de déterminer  $\tau_{eff}$ , il faut bien évidemment évaluer cette force image. Nous pouvons naturellement appliquer le modèle de dislocation avec toutes les approximations nécessaires. Ce calcul est très lourd et la précision n'est pas très élevée. Dans notre étude de la dislocation vis [13], nous avons proposé une méthode simple et sans approximation, fondée sur ces mêmes simulations. En effet, il suffit de mesurer l'énergie de la dislocation en fonction de la distance qui la sépare de la surface  $E(x)$ , pour déterminer la contrainte associée à la surface  $\tau_s$ . La dérivée de cette énergie  $\partial E(x)/\partial x$  est simplement égale à  $(-\tau_s b l)$ , où  $l$  est la longueur de la dislocation.  $\tau_s$  peut être ajouté tout simplement à la contrainte appliquée lorsque la dislocation est rectiligne. En revanche, si la dislocation est courbée, il est très difficile de rendre compte de l'attraction de la surface.

C'est la contrainte effective qui représente la variable thermodynamique appropriée, comme cela a été discuté par Schoeck [69] et Hirth et Nix [70]. Si elle confondue avec la contrainte appliquée, l'estimation du volume d'activation devient, en fait, erronée. La raison est que la contrainte intervenant dans l'énergie d'activation  $\Delta G(\tau_{eff})$  n'est pas la contrainte appliquée mais la contrainte effective, puisque c'est celle qui agit sur l'obstacle. Si l'on considère la contrainte appliquée, le volume d'activation obtenu est un volume apparent  $\overline{V^*}$ , à ne pas confondre avec le véritable volume d'activation qui caractérise l'obstacle  $V^*$  :

$$V^* = -\frac{\partial G}{\partial \tau_{eff}} = -\frac{w}{l} \frac{\partial G}{\partial \tau_{app}} = \frac{w}{l} \overline{V^*}. \quad (3.5)$$

Comme nous pouvions nous y attendre, le volume apparent est beaucoup plus élevé que le "vrai" volume. En effet, dans l'approche classique, au lieu de considérer la résistance locale de l'obstacle, on "distribue" sa résistance sur toute la ligne de la dislocation. Même si le volume

apparent est erroné, il faut signaler que les deux approches conduisent au même travail de la contrainte appliquée puisque  $V^* \tau_{eff} = \overline{V^*} \tau_{app}$ . La sensibilité à la contrainte appliquée est donc préservée dans les deux cas.

Il est intéressant de noter que, dans le cas d'obstacles localisés, le volume d'activation mesuré expérimentalement coïncide avec le volume apparent. C'est pourquoi la confusion entre les deux volumes, physique et apparent, est très répandue dans la littérature (voir par exemple [71,72]), sans pour autant induire d'erreur de calcul, comme précisé ci-dessus. Néanmoins, sans la mise à l'échelle de ce volume, comme indiqué dans l'équation 3.5, le volume apparent ne correspond pas à une quantité caractéristique des obstacles ni de la microstructure. La correction nécessite la connaissance de la taille des obstacles et de leur espacement moyen.

Par souci de simplicité, quel que soit le cas, nous désignerons par  $\tau$  la résultante de toutes les contraintes agissant sur le segment ancré par l'obstacle.

### 3.3.2. Probabilité de survie

L'activation thermique entraînant le désancrage de la dislocation fait partie des processus stochastiques bien connus en physique [73,74]. Il est donc nécessaire d'établir une base mathématique pour la description du comportement probabiliste. Cela passe par le calcul de la probabilité de survie du système.

Considérons d'abord un intervalle d'observation :  $t \in I = [0 ; \theta]$  et une variable aléatoire  $s$  désignant le nombre d'événements activés thermiquement pouvant se produire dans cette intervalle. Nous pouvons alors définir la densité de probabilité  $p_s(t_1, \dots, t_s)$  traduisant la probabilité d'observer ces événements dans un voisinage  $dt$  autour des temps  $t_1, \dots, t_s$ . Quant aux probabilités sur l'intervalle  $I$ , elles sont notés  $P_s(\theta)$ . Il est important de préciser ici que nous devons exclure la probabilité d'avoir plus d'un seul événement pendant l'intervalle  $dt$ . La condition de normalisation s'obtient évidemment sur la somme de toutes les  $P_s(\theta)$ . Lorsque les événements sont indiscernables, nous pouvons déduire :

$$P_s(\theta) = \frac{1}{s!} \int_0^\theta p_s(t_1, \dots, t_s) dt_1 \dots dt_s. \quad (3.6)$$

La description du comportement stochastique s'associe très souvent à la fonction  $\omega(t)$  traduisant la fréquence d'activation par unité de temps à un temps donné  $t$ . Cette fonction est appelée en anglais *rate function*, sans véritable correspondance en français. Nous allons l'appeler dans la suite du texte "taux d'activation". Cette fonction suit généralement la loi d'Arrhenius :

$$\omega(t) = \nu \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau_{eff})}{kT}\right), \quad (3.7)$$

où  $\nu$  est un facteur à dimension de fréquence,  $k$  la constante de Boltzmann,  $\Delta G$  l'énergie d'activation et  $\tau_{eff}$  la contrainte effective. Une différence subtile distingue  $\omega(t)$  de la densité de probabilité à un seul événement  $p_1(t)$ . En effet, contrairement aux densités de probabilité en général,  $\omega(t)$  n'accepte pas de normalisation et est indépendante de l'historique du processus. La relation entre cette fonction et les densités de probabilité est donnée par [74] :

$$\omega(t) = p_1(t) + \sum_{s=2}^{\infty} \frac{1}{(s-1)!} \int_0^{\theta} p_s(t, t_1, \dots, t_{s-1}) dt_1 \cdots dt_{s-1} \quad (3.8)$$

De l'équation 3.8, nous pouvons facilement déduire la propriété importante suivante:

$$\langle n \rangle = \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{(s-1)!} \int_0^{\theta} p_s(t_1, \dots, t_s) dt_1 \cdots dt_s = \int_0^{\theta} \omega(t) dt \quad (3.9)$$

Concentrons nous sur un cas simple où un seul événement d'activation est possible dans l'intervalle  $I$ . La probabilité d'avoir l'activation dans l'intervalle sera désignée par  $P(\theta)$  et la probabilité de survie par  $P_o(\theta)$ . Nous avons donc  $P(\theta) + P_o(\theta) = 1$ . Pour déduire la probabilité de survie, il suffit de retenir le raisonnement suivant. Après un temps écoulé de  $t$  sans activation, l'équation maîtresse stipule que la probabilité  $dP(t)$  d'avoir l'activation entre  $t$  à  $(t + dt)$  est proportionnelle à la probabilité de survie jusqu'à  $t$ , c'est-à-dire  $P_o(t)$ , et au taux d'activation dans  $dt$  :  $\omega(t)dt$ . Cette probabilité infinitésimale est également égale à la diminution de la probabilité de survie. Par conséquent, nous avons  $dP_o(t) = -P_o(t)\omega(t)dt$ , dont l'intégration donne :

$$P_o(\theta) = \exp \left[ - \int_0^{\theta} \omega(t) dt \right] \quad (3.10)$$

La densité de probabilité  $p(\theta)$  pour que l'activation intervienne entre  $\theta$  et  $\theta + d\theta$  s'obtient en dérivant  $P(\theta)$  par rapport à  $\theta$  :

$$p(\theta) = \omega(\theta) \exp \left[ - \int_0^{\theta} \omega(t) dt \right] \quad (3.11)$$

Ceci nous permet de déduire finalement le temps moyen d'activation, appelé temps d'incubation ou temps de survie :

$$\langle \theta_s \rangle = - \int_0^{\infty} \theta \omega(\theta) \exp \left[ - \int_0^{\theta} \omega(t) dt \right] d\theta \quad (3.12)$$

Ce que nous pouvons mesurer en DM est la contrainte  $\tau(t)$  et la déformation  $\gamma(t)$  en fonction du temps. Le temps de survie peut être aussi facilement déterminé grâce à la chute de la contrainte. La question qui s'est posée pendant plusieurs années et qui a empêché l'exploitation des résultats de la DM aux échelles supérieures est la suivante : en connaissant seulement  $\tau(t)$ ,  $\gamma(t)$  et  $\theta_s$ , comment arriver à déduire l'énergie d'activation  $\Delta G(\tau)$  ou  $\omega(\tau)$  ? A l'exception des comparaisons et des descriptions qualitatives, il est en effet difficile d'obtenir des grandeurs bien déterminées. La difficulté principale est que la probabilité de survie (équation 3.10) fait intervenir l'intégrale de  $\omega(t)$ , qui est la grandeur recherchée.

Nous avons proposé la première tentative d'analyse en 2005 [13] pour expliquer l'origine de l'écart de niveau de contrainte entre l'expérience et les simulations du mouvement de la dislocation vis à basse température. Ensuite, nous avons proposé [65] une méthode générale pour la détermination de l'énergie d'activation en fonction de la contrainte critique. Récemment, un article [75] a tenté d'expliquer la base du traitement stochastique de la méthode et la différence par rapport aux méthodes proposées dans la littérature, fondées sur la



théorie de transition [76,77] ou sur d'autres théories [78]. D'autres méthodes ont été proposées pour analyser les résultats expérimentaux [79].

Nous présentons ici rapidement cette méthode. Nous allons voir que, lorsque la contrainte est constante tout au long de la simulation, le taux d'activation correspondant peut être facilement déterminé. L'idée est donc d'assimiler la simulation réelle (à contrainte variable) à une simulation à contrainte constante. Le défi est d'être en mesure d'évaluer la valeur de cette contrainte et de prouver que les deux simulations sont équivalentes en termes probabilistes.

### 3.3.3. Cas de contrainte constante

Supposons d'abord que la simulation aurait été réalisée à contrainte constante  $\tau = \tau_c$ , ce qui rend le taux d'activation aussi constant  $\omega(t) = \omega_c$ . Dans ce cas simple, la probabilité de survie se transforme en une fonction exponentielle  $P_o(\theta) = \exp(-\omega_c \theta)$  ; l'activation devient aléatoire et suit la distribution de Poisson. Mais la conséquence la plus importante est que le temps d'incubation moyen est maintenant donné par :

$$\langle \theta_s \rangle = - \int_0^{\infty} \theta \omega_c \exp(-\omega_c \theta) = \frac{1}{\omega_c} \quad (3.13)$$

Dans le cas d'une contrainte constante, il est donc possible de calculer le taux d'activation à partir de la mesure du temps moyen d'incubation. Étant donné la loi d'Arrhenius, l'énergie d'activation peut être calculée selon la relation  $\Delta G(\tau) = kT \ln(\nu \langle \theta_s \rangle)$ .

Ici nous devons souligner une difficulté intrinsèque à la théorie de transition [80,81] : la détermination de la valeur précise de la fréquence d'attaque  $\nu$  pose un sérieux problème. Il est en effet difficile d'imaginer une façon simple d'évaluer ou de calculer les modes de fréquence propres au système à l'état de col (*saddle point*), puisque, par définition, cet état est instable.

Dans la mesure où seul l'ordre de grandeur est ici nécessaire, la tendance actuelle est d'en donner une estimation approximative [82,83], même si plusieurs barrières activées thermiquement sont présentes [84]. Comme indiqué récemment [75], selon la nature de l'obstacle, il convient de distinguer entre le cas de l'obstacle local et le cas d'une barrière énergétique uniforme comme la vallée de Peierls. Dans le cas d'un obstacle local de taille  $w$ , l'approximation adéquate est  $\nu = \nu_D \times b/w$ , ce qui donne la formule suivante pour l'évaluation de l'énergie d'activation :

$$\Delta G(\tau_c) = kT \ln \left( \langle \theta_s \rangle \nu_D \frac{b}{w} \right) \quad (3.14)$$

En revanche, lorsque la résistance au mouvement de la dislocation est uniforme, l'expérience [85] montre qu'il faut intégrer le nombre de sites de germination en concurrence. En plus du ralentissement de la fréquence avec l'augmentation de la taille critique  $w$ , prise en compte dans l'équation 3.14, il faut maintenant ajouter l'augmentation de la probabilité de germination avec l'augmentation du nombre de sites de germination (voir la discussion dans Tang *et al.* [86]). Dans ce cas, l'énergie d'activation est donc donnée par :

$$\Delta G(\tau_c) = kT \ln \left( \langle \theta_s \rangle \nu_D \frac{bl}{w^2} \right) \quad (3.15)$$

Nous notons ici qu'une des caractéristiques des équations 3.14 et 3.15 est que la proportionnalité entre l'énergie d'activation et la température, observée si souvent expérimentalement, n'est pas tout à fait exacte. Elle résulte de la stabilité du terme logarithmique. Il est en effet peu probable que ce facteur change dramatiquement avec la température. Le facteur susceptible de changer le plus est le temps d'incubation moyen. Or comme montré dans la Fig. 15, ce temps diminue mais pas suffisamment pour entraîner un changement significatif du logarithme. Nous reviendrons sur ce point dans la section suivante.

### 3.3.4. Énergie d'activation à vitesse de déformation imposée

Nous avons vu dans la section précédente qu'il est possible, lorsque la contrainte est constante, d'évaluer l'énergie d'activation. Mais comme nous l'avons vu, dans les simulations à vitesse de déformation imposée la contrainte fluctue fortement. La question qui se pose alors est la suivante : peut-on imaginer une simulation à contrainte constante  $\tau = \tau_c$ , qui serait équivalente, du point de vue stochastique, à la simulation réelle avec  $\tau = \tau(t)$  ? Le terme "équivalent" nécessite ici d'être clarifié. L'équivalence en termes probabilistes dans un milieu stochastique revient naturellement à imposer le même temps de survie  $\theta_s$  dans les deux cas. Il convient donc de prendre  $\tau_c$  telle que la probabilité de survie après  $\theta_s$  soit la même. Cette contrainte constante, ainsi déterminée, est appelée contrainte critique, pour une raison qui deviendra claire dans la suite de ce chapitre. Grâce à l'équation 3.10, l'égalité des probabilités de survie revient à :

$$\exp(-\omega_c \theta_s) = \exp\left[-\int_0^{\theta_s} \omega(t) dt\right] \quad (3.16)$$

La solution de l'équation 3.16 est donnée par :

$$\omega_c = \frac{1}{\theta_s} \int_0^{\theta_s} \omega(t) dt = \langle \omega(t) \rangle \quad (3.17)$$

Pour avoir la même probabilité de survie après  $\theta_s$  avec une contrainte constante, il suffit donc d'imposer que la valeur du taux d'activation  $\omega_c$  soit égale à la moyenne du taux d'activation dans la simulation. En considérant un développement limité de l'énergie d'activation :  $\Delta G(\tau) = A - V^* \tau$ , nous aboutissons à la formule donnant la valeur de  $\tau_c$  :

$$\tau_c = \frac{kT}{V^*} \ln \left\langle \exp\left(\frac{V^* \tau}{kT}\right) \right\rangle. \quad (3.18)$$

Par ailleurs, nous avons montré dans le cas du mécanisme du double-décrochement [75] que l'hypothèse du volume constant n'est pas très forte ; la valeur de  $\tau_c$  est très peu sensible à la valeur choisie du volume. En effet, dans l'équation 3.18, la valeur de  $\tau_c$  dépend surtout du profil  $\tau(t)$  et de la température.

A cette étape de la démarche, nous avons démontré que le taux d'activation constant, résultant d'une contrainte effective constante donnée par l'équation 3.18, fournit la même probabilité de survie à la fin du temps d'incubation  $\theta_s$ , obtenue dans la simulation MD.

Cependant, n'oublions pas qu'il s'agit d'un processus stochastique. Il faut donc plusieurs simulations indépendantes, à la même température et vitesse de déformation, pour pouvoir

rendre compte de la fluctuation de  $\tau_c$  et de  $\theta_s$ . Lorsque  $n$  simulations indépendantes sont réalisées, nous disposons alors de  $n$  estimations de  $\tau_c$  et de  $\theta_s$ , notées  $\tau_{c,n}$  et  $\theta_{s,n}$ . L'étape suivante est donc de déduire la valeur de la contrainte effective  $\tau_c$  qui serait équivalente, du point de vue probabiliste, à  $\tau(t)$  pour toutes ces simulations. Cette condition impose que la somme des probabilités de survie sur les intervalles  $\theta_{s,n}$  soit la même que celle obtenue avec une contrainte constante  $\tau_c$ . En langage mathématique, ceci se traduit par:

$$\sum_n \exp\left(-\int_0^{\theta_{s,n}} \omega(t) dt\right) = \sum_n \exp(-\omega_c \theta_{s,n}). \quad (3.19)$$

Comme nous avons montré que, pour chaque événement, la valeur de  $\tau_{c,n}$  reproduisait la même probabilité de survie que  $\tau(t)$  à  $t = \theta_{s,n}$ , l'équation 3.19 peut être simplifiée ainsi :

$$\langle \exp(-\omega_{c,n} \theta_n) \rangle = \langle \exp(-\omega_c \theta_n) \rangle \quad (3.20)$$

A notre connaissance, il n'existe pas de solution analytique en  $\omega_c$  de l'équation 3.20. Même simplifiée, elle ne peut être résolue que numériquement. Dans la plupart des cas – voir plus loin dans ce chapitre – nous pouvons prendre  $\tau_c$  égale à la moyenne arithmétique de  $\tau_{c,n}$ .

Une fois la contrainte effective équivalente  $\tau_c$  déterminée, nous pouvons facilement déterminer l'énergie d'activation associée grâce aux équations 3.14 ou 3.15. Nous allons maintenant présenter deux exemples de détermination de l'énergie d'activation.

## 3.4. Application au mécanisme de Peierls

### 3.4.1. Cas de la dislocation vis

Le mouvement de la dislocation dans la vallée de Peierls a fait l'objet de nombreux travaux théoriques [60,68,87,88] et simulations atomiques [13,30,76,89](voir la discussion dans [90,91]). L'objectif est toujours d'expliquer la forte dépendance de la contrainte d'écoulement en fonction de la température. Le problème des modèles théoriques est la nécessité d'extrapoler la théorie élastique – seul cadre théorique disponible – aux phénomènes d'échelle atomique. Quant aux simulations atomiques, la difficulté a résidé pendant longtemps dans l'extraction de données physiques du processus de double-décrochement.

Nous verrons dans ce chapitre comment notre méthode de transition permet de déduire les paramètres d'activation de ce mécanisme.

Comme nous l'avons vu dans la Fig. 6, la courbe de déformation se décompose en plusieurs phases. Chacune d'elle est caractérisée par une période où la contrainte augmente puis chute rapidement, associée à la formation et à la propagation d'un ou plusieurs double-décrochements.

Nous savons [47] qu'une avalanche peut survenir dans les phases de chute, provoquée par l'annihilation des décrochements, en raison des conditions périodiques. Ceci produit une forte augmentation locale de la température, provoquant la germination d'un autre double-décrochement. Pendant une telle avalanche, les germinations ne se produisent pas à la température moyenne du cristal. Notre méthode d'analyse ne s'applique pas. Nous ne pouvons

donc appliquer notre analyse stochastique que durant les périodes où la contrainte croît. Par conséquent, chaque courbe de déformation peut être modélisée par une succession d'événements d'activation thermique. Chacune correspond à une réalisation donnée ou à un chemin d'activation différent. Nous avons donc à notre disposition l'équivalent d'un ensemble de simulations indépendantes nous permettant de calculer les moyennes nécessaires.

Afin de clarifier la méthode, nous allons utiliser les données expérimentales [90], permettant de fournir l'énergie d'activation en fonction de la contrainte effective, pour calculer les probabilités puis nous comparerons ces probabilités à celles déterminées par notre méthode d'analyse des simulations DM [13]. Dans la Fig. 10, nous montrons la forme d'une courbe de déformation à 300 K, ainsi que l'évolution des probabilités d'activation  $P_n(t)$  pour chaque événement, calculées à partir des données expérimentales. Bien évidemment, les périodes de chute en sont exclues. Les probabilités à la fin de chaque période varient d'un événement à l'autre, avec une valeur moyenne de 0.51.

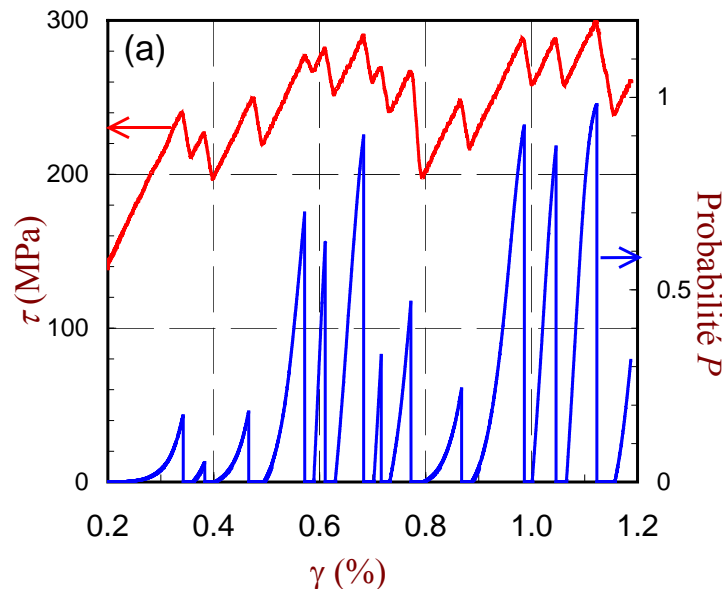


Fig. 10: évolution de la contrainte et de la probabilité d'activation de double décrochement (évaluée à partir des résultats expérimentaux) en fonction de la déformation pour une dislocation vis à 300K

Ici, nous pouvons rappeler que la moyenne des probabilités d'activation ne doit pas forcément être à 0,5, à moins que la valeur médiane de la distribution soit égale à la valeur moyenne.

Avec une valeur du volume d'activation de  $20b^3$  [90], nous pouvons évaluer les contraintes critiques associées à chaque événement  $n$  et, ensuite, calculer les probabilités  $P_n(t)$  correspondantes. Les résultats sont tracés dans la Fig. 11 ci-dessous. La courbe de déformation a été ajoutée pour faciliter la comparaison. La valeur de chaque contrainte critique  $\tau_{c,n}$  est affichée comme ligne horizontale pendant les périodes de chargement.

Nous constatons tout d'abord qu'à la fin de chaque période de chargement, la valeur de  $P_n$  dans la Fig. 11 est identique à celle de la Fig. 10, calculée à partir de la courbe réelle de la contrainte. Cette égalité n'est pas surprenante dans la mesure où les valeurs de  $\tau_{c,n}$  sont conçues pour conserver les probabilités de survie. Ceci confirme que l'effet de la contrainte

$\tau(t)$  calculée au cours de la simulation est équivalente à une contrainte constante égale à la contrainte critique.

Dans la Fig. 11, la ligne horizontale pointillée indique le niveau de la contrainte critique globale  $\tau_c$  évaluée à partir de l'équation 3.20. La moyenne des probabilités calculées à la fin des phases de chargement est égale à 0.51, c'est-à-dire la même que la moyenne des probabilités de la Fig. 10.

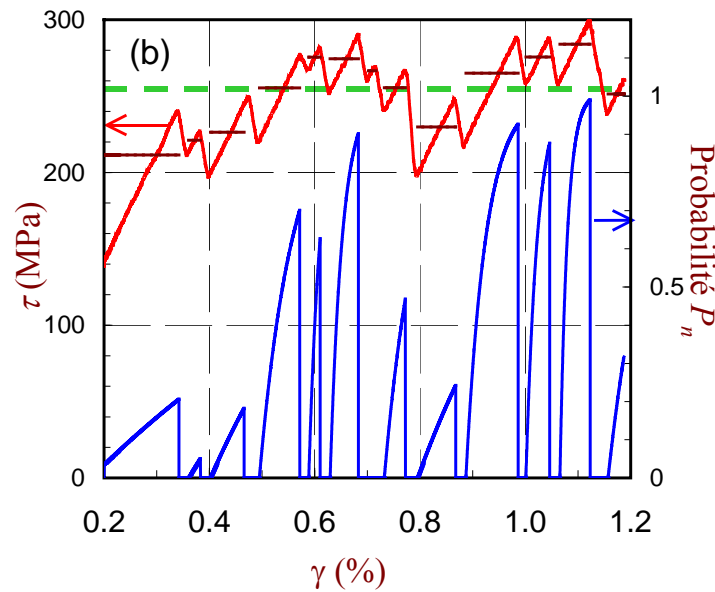


Fig. 11: évolution de la probabilité de saut pour chaque événement, calculée à contrainte constante. Les valeurs de la contrainte critique pour chaque événement sont indiquées par les segments horizontaux. La droite pointillée marque le niveau de la contrainte effective associée à toute la simulation, calculée par l'équation 3.20.

Pour résumer, nous pouvons donc assigner une valeur de contrainte unique constante  $\tau_c$  équivalente, du point de vue stochastique, à la fonction  $\tau(\gamma)$  exposée dans la Fig. 10. Nous sommes alors capables de déterminer l'énergie d'activation associée. Cette contrainte possède la même signification que la contrainte critique dans les essais mécaniques de tractions sur les monocristaux [92,93,94].

Compte tenu de la nature de l'obstacle, nous choisissons la formule dans l'équation 3.15 pour déterminer l'énergie d'activation. Dans le cas précis de la Fig. 10, nous trouvons une valeur de 0.13 eV pour une contrainte critique de 254.4 MPa. Pour la même contrainte, l'énergie d'activation lissée aux valeurs expérimentales [91] est très proche de cette valeur. Cette excellente corrélation avec les résultats expérimentaux confirme la validité des analyses effectuées.

Parallèlement à la procédure d'évaluation de l'énergie d'activation, notre approche nous a permis de réaliser une comparaison directe entre l'évolution de la contrainte critique mesurée en simulation  $\tau_{sim}(T)$  et celle donnée par l'expérience  $\tau_{exp}(T)$  en fonction de la température. Comme nous l'avons signalé plus haut, la contrainte critique  $\tau_{sim}(T)$  définie dans l'équation 3.20 est la contrainte *constante* équivalente, en termes probabilistes, à la courbe de chargement effective de la simulation. De même,  $\tau_{exp}(T)$  est la contrainte critique

caractéristique des conditions expérimentales. Il est donc tout à fait normal de pouvoir comparer les deux profils.

Comme montré initialement dans [13], la contrainte critique ne dépend pas seulement de la température et de la vitesse de déformation. Elle dépend aussi de la longueur moyenne des dislocations. Compte tenu de la différence entre les conditions expérimentales et simulées, à la même température, on observe un écart entre l'énergie d'activation mesurée en expérience  $\Delta G_{exp}$  et celle obtenue en simulation  $\Delta G_{sim}$  :

$$\Delta G_{exp}(T) = \Delta G_{sim}(T) + kT \ln \frac{v_{sim} L_{exp}}{v_{exp} L_{sim}} \quad (3.21)$$

La différence entre les deux énergies n'est pas du tout négligeable ; elle est de l'ordre de  $21 kT$ , alors que l'énergie d'activation mesurée expérimentalement est donnée par  $\Delta G_{exp} = C_{exp} kT = 25 kT$ . Utilisant l'équation 3.21, nous pouvons déduire que dans les simulations DM nous avons  $\Delta G_{sim} = C_{sim} kT = 4 kT$ . La différence entre les conditions de mouvement de la dislocation vis dans les simulations et au laboratoire explique donc la faible sensibilité à la température dans les simulations [13]. Comme l'énergie d'activation est fonction de la seule contrainte critique, nous pouvons traduire le terme logarithmique de l'équation 3.21 en différence de température. Ainsi,  $\Delta G_{sim}$  à une température donnée  $T$  serait égale à  $\Delta G_{exp}$  mesurée non pas à  $T$  mais à une fraction de  $T$  déduite de l'équation suivante :

$$\Delta G_{sim}(T) = \Delta G_{exp} \left[ \left( C_{exp} - \ln \frac{v_{sim} L_{exp}}{v_{exp} L_{sim}} \right) \frac{T}{C_{exp}} \right] = \Delta G_{exp} \left( \frac{4}{25} T \right) \quad (3.22)$$

Autrement, l'équation 3.22 stipule que le niveau de la contrainte atteint en simulation DM à une température donnée doit être mesuré expérimentalement à  $0,16 T$ .

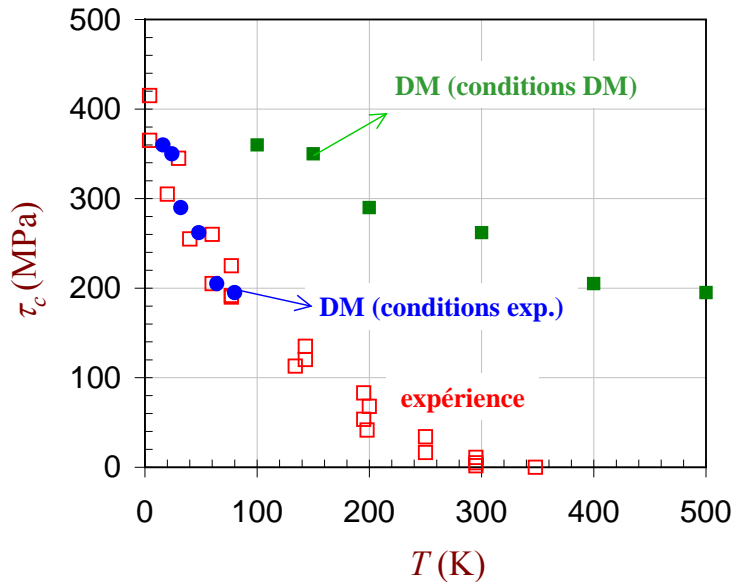


Fig. 12: évolution de la contrainte critique obtenue en simulation DM et en expérience, ainsi que la contrainte critique déduite des simulations dans les conditions expérimentales.

Il est facile de constater dans la Fig. 12 que lorsque nous ajoutons la quantité d'énergie manquante, c'est-à-dire le terme  $21 kT$ , nous retrouvons la même sensibilité expérimentale à la

température. Ainsi, dans les rares cas où l'énergie d'activation a pu être mesurée expérimentalement, les résultats des simulations DM se révèlent en excellent accord avec l'expérience. Les principales critiques contre les simulations DM (grande vitesse de déformation, petite taille du cristal simulé, problèmes des conditions aux limites) sont dans ce cas précis sans fondement.

Dans les conditions typiques de simulation, l'énergie d'activation disponible en DM est donc faible et de l'ordre de seulement  $4 kT$ . Nous pouvons en tirer la conclusion suivante : lorsque la hauteur de la barrière est élevée, il devient impossible de simuler en DM l'activation à contrainte zéro. La hauteur de la vallée de Peierls pour les dislocations vis est d'environ 0.84 eV. En expérience, où  $\Delta G_{exp} = 25 kT$ , la température  $T_a$  correspondant au début du plateau athermique est donc de l'ordre de 400 K (cette valeur n'est qu'un ordre de grandeur en raison de la viscosité à haute température). Ce qui est important est de constater que ce plateau ne sera jamais atteint en DM. Cette température serait environ de 2440 K. Autrement dit, dans les conditions actuelles, nous ne pourrions pas étudier en DM le comportement des dislocations dans le régime athermique.

### 3.4.2. Dislocation coin dans les plans {112}

Contrairement à la dislocation vis (voir section précédente), nous disposons de très peu de données expérimentales concernant la dislocation coin dans les plans {112}. L'interprétation des résultats DM est donc plus délicate. Or nous avons vu qu'une valeur approximative du volume d'activation est nécessaire pour déduire la contrainte critique. C'est pourquoi nous avons réalisé des simulations à différentes vitesses de déformation mais à une température constante de 77 K (voir Fig. 13). Dans cette figure, nous indiquons l'évolution de la contrainte moyenne de saut en fonction de la vitesse de déformation.

Nous supposons que la variation relative de la contrainte moyenne de saut est la même que la variation de la contrainte critique en fonction de la vitesse.

Considérons une vitesse de déformation activé thermiquement  $\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_o \exp(-\beta\Delta G)$ , où  $\beta$  est le paramètre de température  $(kT)^{-1}$ . Si nous développons  $\Delta G = A - V\tau$ , la contrainte varie en fonction de la vitesse selon l'équation :

$$\tau = \frac{A - kT \ln \dot{\gamma}_o}{V} + \frac{kT}{V} \ln \dot{\gamma} \quad (3.23)$$

A température constante, si la contrainte varie d'une façon logarithmique, cela signifie que le volume reste relativement constant. La Fig. 13 montre le meilleur lissage logarithmique de la contrainte. L'accord avec le profil logarithmique est remarquable, ce qui nous conforte dans l'hypothèse d'une relative stabilité du volume. Le volume utilisé pour lisser la courbe dans la figure est de  $4.8 b^3$ . Comparé au volume associé au cas de la dislocation vis (près de  $20 b^3$ ), le volume trouvé est donc faible.

Ceci est compatible avec nos observations de la forme du double-décrochement critique [47] et, compte tenu de la faible hauteur de la barrière énergétique, il est plus ou moins prévisible.

Une fois le volume déterminé, nous pouvons utiliser les équations 3.18 et 3.20 pour calculer la contrainte critique en fonction de la température. Les résultats sont exposés dans la Fig. 14. La différence entre les contraintes critiques dans le sens de maclage et antimaclage s'estompe

rapidement. Même dans les conditions DM, la contrainte critique devient insignifiante à 200 K.

En suivant la même stratégie adoptée dans le cas de la dislocation vis, nous pouvons opérer une transition d'échelle à partir des conditions de DM vers les conditions du laboratoire. Mais, dans le cas présent, nous n'avons aucune information sur l'énergie d'activation dans les conditions expérimentales.

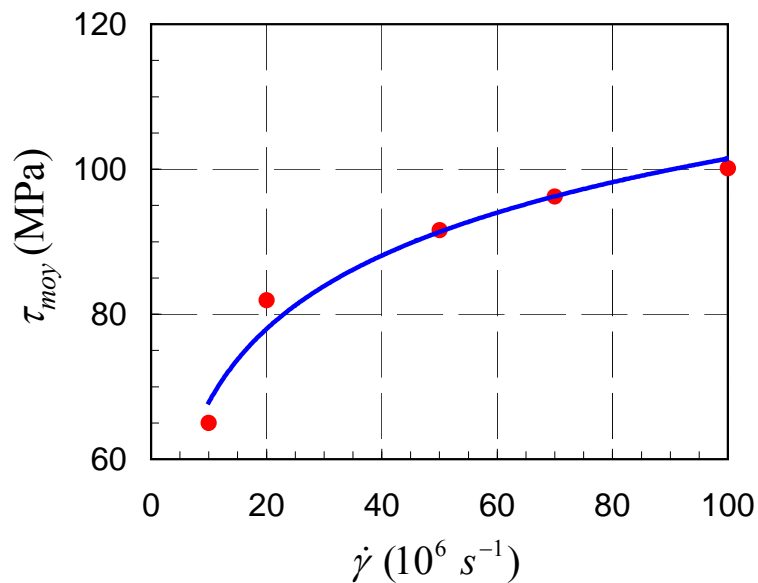


Fig. 13: les cercles indiquent l'évolution de la contrainte moyenne de saut en fonction de la vitesse de déformation pour une dislocation coin dans le plan  $\{112\}$  à 77 K. La ligne continue représente le meilleur lissage logarithmique.

Pour progresser dans notre raisonnement, nous considérons que, pour un matériau donné, les fluctuations thermiques, disponibles à une température  $T$ , ne dépendent que de cette température. Par conséquent, la constante  $C$  dans l'expression  $\Delta G = CkT$ , est une *caractéristique du matériau*. Selon cette logique, afin de franchir un obstacle, la contrainte effective doit s'ajuster pour fournir la partie manquante de l'énergie mécanique nécessaire, d'où la sensibilité à la température de la contrainte critique.

Si nous observons maintenant que l'écart entre les conditions expérimentales et en DM est sensiblement le même que dans le cas de la dislocation vis, nous pouvons déduire que le facteur de correction doit être également proche de  $21 kT$ . Par conséquent, la relation entre les contraintes critiques dans les deux types de conditions doit être aussi décrite par l'équation 3.22. Cette correction nous amène à la courbe continue de la Fig. 14.

La diminution de  $\tau_c$  en fonction de la température dans les conditions de laboratoire est fortement marquée. Le régime d'activation thermique pour les dislocations coin  $\{112\}$  prend fin à 30 K environ.



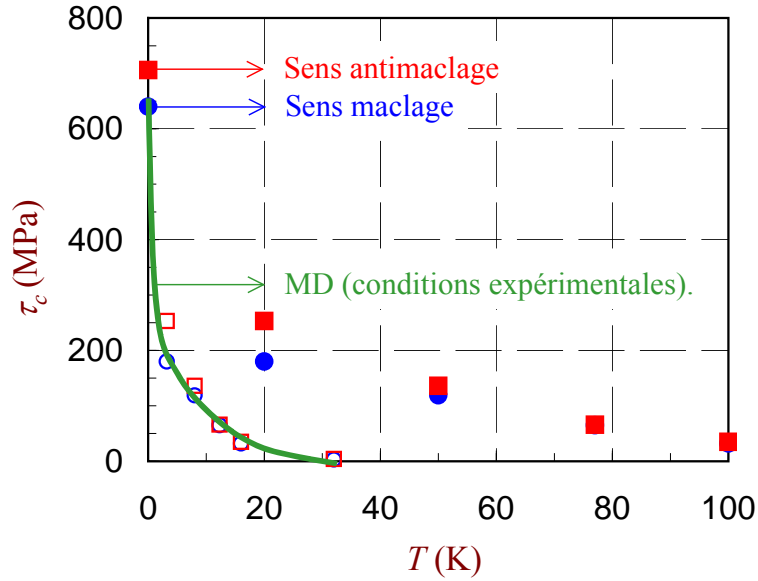


Fig. 14: évolution de la contrainte critique (symboles pleins) obtenue en simulation DM pour la dislocation coin  $\{112\}$ , ainsi que la contrainte critique déduite des simulations dans les conditions expérimentales (ligne continue et symboles ouverts).

Cela nous indique que, dans les conditions habituelles de déformation, la dislocation coin dans les plans  $\{112\}$  ne fournit *presque* plus de résistance à la déformation plastique. Elle a une mobilité équivalente à celle de la dislocation coin dans les plans de glissement principaux  $\{110\}$  (voir [35,37]).

### 3.5. Énergie d'activation pour le désancrage des cavités

Nous reprenons ici l'exemple de la dislocation coin dans le plan  $\{110\}$  réagissant avec une cavité de 1 nm de taille. Un exemple de l'évolution des courbes de déformation en fonction de la température est donné dans la Fig. 15 ci-dessous. Nous constatons, en général, que l'augmentation de la température conduit à : (i) la diminution rapide de la friction du réseau ; (ii) la diminution du temps et de la contrainte maximale de désancrage ; (iii) l'accentuation du caractère stochastique de l'interaction.

Notre analyse est fondée sur l'emploi de la notion de la contrainte effective, c'est-à-dire la résultante locale de la contrainte au niveau de l'obstacle  $\tau_{eff}$ . Lorsque nous parlons de la contrainte critique  $\tau_c$ , ou de la contrainte maximale  $\tau_{max}$ , celles-ci seront déduites de la contrainte effective établie à partir de l'équation 3.3 et non de la contrainte appliquée.

L'effet de la température sur l'interaction montré dans la Fig. 15 est typique [9]. D'abord la contrainte critique équivalente est évaluée à chaque température, utilisant l'équation 3.18. Ici, l'ordre de grandeur du volume d'activation est donné par  $wb^2$ , où  $w$  désigne la taille de l'obstacle. Une comparaison entre les contraintes effectives maximales et critiques est montrée dans la Fig. 16 ci-après. Nous observons que  $\tau_c$  tend vers  $\tau_{max}$ , lorsque la température tend vers zéro.

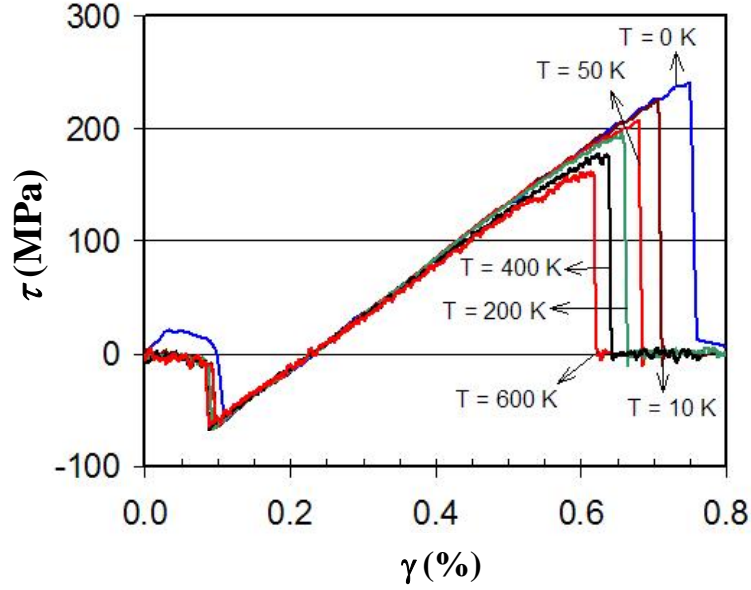


Fig. 15: effet de la température sur la courbe de chargement pour une interaction entre une dislocation coin de longueur 21 nm avec une cavité de 1 nm.

En revanche, à haute température, l'écart entre  $\tau_c$  et  $\tau_{max}$ , tend à se stabiliser. Afin de "sentir" la relation entre ces deux grandeurs, nous proposons de simplifier l'équation 3.18. En effet, comme la contrainte évolue pratiquement d'une façon linéaire avec le temps, cette équation peut s'écrire [65] :

$$\tau_c = \tau_{max} - \frac{kT}{V} \ln \frac{V\tau_{max}}{kT} \quad (3.24)$$

Dans l'équation 3.24, la variation de  $T$  est largement prépondérante devant la variation de  $V$ . Pour cette raison, la valeur de  $\tau_c$  est plus sensible à la température qu'à la valeur de  $V$ .

Par ailleurs, le deuxième terme de cette équation représente, en quelque sorte, "l'efficacité" de l'activation thermique, puisqu'il représente l'historique du chargement. L'écart relatif entre  $\tau_c$  et  $\tau_{max}$  augmente d'une façon monotone pour arriver à 27 % à 600 K. Nous avons montré que  $\tau_c$  est bien la grandeur qui intègre l'aspect stochastique et permet de conserver la probabilité de survie.

L'évaluation de l'énergie d'activation peut être réalisée en utilisant la formule de l'équation 3.14 où seule la taille de l'obstacle intervient dans la fréquence d'attaque. Pour appliquer cette formule, nous avons réalisé à chaque température au moins quatre simulations indépendantes permettant d'obtenir une bonne estimation de la moyenne du temps d'incubation  $\langle \theta_s \rangle$ , définie par l'équation 3.12. La variation de l'énergie d'activation en fonction de la température est tracée dans la Fig. 17.

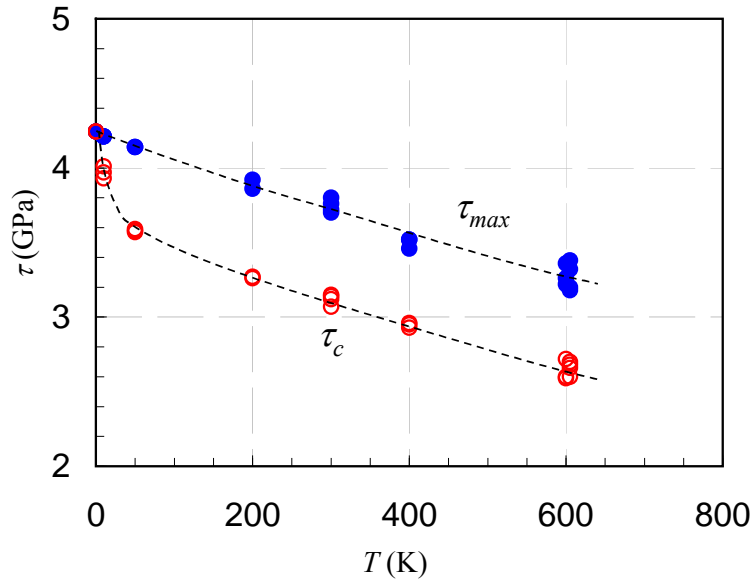


Fig. 16: évolution de la contrainte effective maximale et critique en fonction de la température.

La tendance qui se dégage immédiatement de cette figure est la proportionnalité avec la température, une proportionnalité retrouvée dans toutes les mesures expérimentales de l'énergie d'activation [93,95,96].

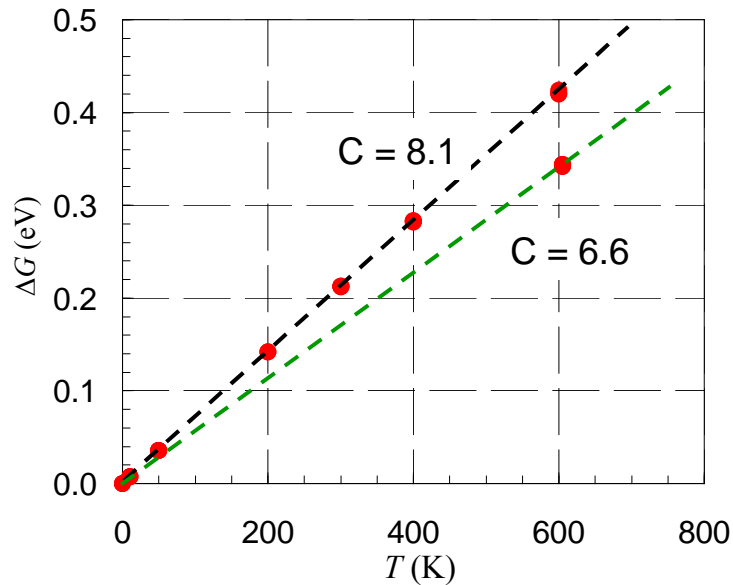


Fig. 17: évolution de l'énergie d'activation en fonction de la température. Les deux lignes pointillées indiquent les simulations effectuées à  $10^6 \text{ s}^{-1}$  ( $C = 8.1$ ) et  $5 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$  ( $C = 6.6$ ).

Cette dépendance est donc reproduite par les simulations DM sans aucune variable ajustée ou hypothèse supplémentaire. Sur la figure, nous remarquons un point non aligné sur la ligne  $\Delta G = 8.1 kT$ . Ce qui le distingue des autres points est que les simulations ont été réalisées à une vitesse de déformation de  $5 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ , alors que les autres simulations l'ont été à  $10^6 \text{ s}^{-1}$ . Compte tenu de l'équation 3.14, la constante de proportionnalité  $C$  est donnée par :

$$C = \ln\left(\langle \theta_s \rangle \nu_D \frac{b}{w}\right) \quad (3.25)$$

Or le temps d'incubation moyen n'est pas véritablement constant, comme nous pouvons le constater facilement sur la Fig. 15. Mais cette variation – incluse dans le logarithme – est largement négligeable au regard de la variation de la température. En revanche, lorsque ce temps varie d'un facteur 5 – par exemple le point "anormal" de la Fig. 17 –, la variation ne peut plus être négligée. Pour avoir une idée de l'ordre de grandeur, si la fréquence d'attaque est de l'ordre de  $10^{12}$  Hz, une diminution du temps d'incubation de 5 à 1 ns, fait baisser la constante  $C$  de 8.5 à 6.9, ce qui explique la variation observée dans la Fig. 17.

Ainsi, grâce à l'équation 3.25, nous possédons aussi une explication de l'écart entre les valeurs de  $C$  mesurées en expérience et en simulation. En effet, le temps disponible pour l'interaction en DM est de l'ordre de la nanoseconde, alors que dans le laboratoire celui-ci est de l'ordre de la fraction de seconde. Il est intéressant de signaler que cette transition de temps conduit à l'augmentation de  $C$  de la valeur de 8.1 (trouvée en simulation DM) à environ 25, ce qui est la valeur trouvée expérimentalement [96].

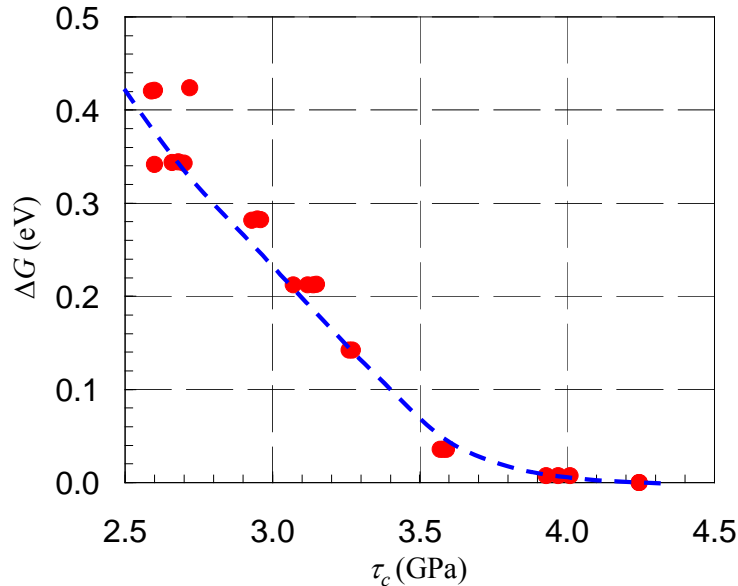


Fig. 18: évolution de l'énergie d'activation en fonction de la contrainte critique effective.

Une fois les deux fonctions  $\Delta G(T)$  et  $\tau_c(T)$  identifiées, nous pouvons construire la fonction  $\Delta G(\tau_c)$ . Cette fonction est tracée dans la Fig. 18. Nous observons que  $\Delta G$  diminue rapidement avec la contrainte à un rythme constant jusqu'à 3.6 GPa, avant de diminuer beaucoup plus lentement à très haute contrainte. Dans la première partie, le volume d'activation est relativement constant et proche de  $3.9 b^3$ , c'est-à-dire du même ordre de grandeur que la valeur choisie pour le calcul de la contrainte critique.

Il faut noter ici que le volume trouvé à partir de la figure 18 est complètement "indépendant" de notre choix initial pour le calcul de la contrainte critique, puisque  $\Delta G$  dépend de la température et du temps moyen d'incubation. Aussi, nous remarquons que le volume d'activation tend vers zéro à très haute contrainte. Cela confirme encore une fois que la valeur

du volume choisie pour le calcul de la contrainte critique n'influence pas le comportement de  $\Delta G(\tau)$ .

En observant cette figure, nous constatons la même limitation de  $\Delta G$  déjà observée dans le cas de la dislocation vis. Même avec une vitesse de déformation relativement faible – comparé aux vitesses employées habituellement en DM – les simulations ne permettent pas d'accéder à des niveaux d'énergie d'activation supérieurs à 0,42 eV. La reste de la courbe à basses contraintes dans la Fig. 18 reste, dans les capacités actuelles de calcul, inexplorable en DM.

## 4. Simulations de dynamique des dislocations

Définissons d'abord ce qu'on entend par "échelle mésoscopique" dans ce mémoire : il s'agit de l'échelle à laquelle les dislocations sont présentes explicitement comme défauts purement linéaires plongés dans un continuum élastique. C'est l'échelle d'observation typique en Microscopie Électronique à Transmission (MET), mais également de l'échelle typique de l'espace de simulation conventionnel de Dynamique des Dislocations (DD). Bien évidemment, la richesse de la description atomique n'y figure plus, mais le volume exploré peut être représentatif de la microstructure. Le but des simulations DD est donc de reproduire et de prédire le comportement collectif des dislocations. Ce comportement est responsable de l'écoulement plastique intragranulaire, c'est-à-dire au sein du grain.

Du point de vue théorique, la contrainte résolue (cission) critique à l'échelle du grain  $\tau_c$  sur un système donné est une forme de superposition de différentes composantes :  $\tau_c = f(\tau_f, \tau_{ss}, \tau_p, \tau_{foret})$ , où  $f$  est une loi de mélange (superposition). Les différentes composantes sont les suivantes :

- $\tau_f$  est la friction du réseau, résultant de l'aspect atomique et discret du cœur de la dislocation dans le métal pur ;
- $\tau_{ss}$  la friction d'alliage provoquée par l'interaction entre la dislocation et les atomes en solution solide ;
- $\tau_p$  le durcissement induit par la présence de défauts locaux comme les particules ou précipités. La distinction avec  $\tau_{ss}$  s'impose en raison de la différence de nature des mécanismes d'interaction associés ;
- $\tau_{foret}$  le durcissement résultant de la présence d'autres dislocations. Ces dernières réagissent fortement avec le système actif et augmentent sa cission critique.

Notons ici deux aspects importants. D'abord, les différentes composantes ne sont pas forcément indépendantes. Ainsi, nous avons montré [97] qu'une contrainte de friction trop élevée conduit à la diminution des forces effectives des jonctions. Ce point sera discuté plus loin dans ce chapitre. En outre, il est parfois difficile de distinguer entre  $\tau_f$  et  $\tau_{ss}$ , en raison d'une profonde modification de la résistance du réseau en présence d'éléments étrangers, notamment en position interstitielle, comme le carbone dans le fer [18,98] ou l'oxygène dans le zirconium ou le titane [99,100]. D'autres fois, la présence d'éléments d'alliage n'est pas accompagnée par un durcissement mais par un adoucissement à basse température [101,102].

Par ailleurs, lorsqu'on explore la limite d'élasticité irréversible d'un matériau, nous utilisons le terme "durcissement" (*strengthening* en anglais), puisqu'il s'agit de l'augmentation de cette limite, ce qui rend le matériau plus "dur". Quant au terme "écrouissage" (*hardening*), il est réservé à l'augmentation dynamique de la contrainte d'écoulement *au cours* de la déformation. Bien que similaires sur plusieurs points, ces deux aspects du comportement mécanique ne doivent pas être confondus.

Dans les sections suivantes, nous faisons un bref rappel de la technique de simulation DD ainsi que des principes de fonctionnement de ces simulations. Ensuite, nous présentons les différents résultats obtenus concernant les différentes composantes citées ci-dessus.

## 4.1. Bref historique de la dynamique des dislocations

Il aura fallu près de trente ans depuis la découverte des dislocations [42,43,44] pour exprimer, dans le cadre de l'élasticité isotrope, la contrainte induite par une dislocation de forme quelconque [103,104,105]. Pour une synthèse de ces travaux, nous renvoyons vers l'ouvrage de Hirth et Loth [68] qui constitue une excellente référence. Les premières applications des formules, relativement complexes et nécessitant une grande capacité de calcul, ont été consacrées à l'étude du fonctionnement des sources de Frank-Read (FR) [106,107] et du mécanisme d'Orowan [108]. Dans ces travaux pionniers, les dislocations sont discrétisées en petits segments rectilignes connectés afin de reproduire la forme de la dislocation courbée. A chaque itération, la contrainte est incrémentée et la forme *d'équilibre* de la dislocation est mise à jour. Ces approches sont donc quasi-statiques. Elles ont permis d'établir et/ou de confirmer des éléments importants dans la théorie élastique des dislocations, comme l'importance du facteur logarithmique dans la contrainte de fonctionnement des sources FR et dans la variation de la tension de ligne de la dislocation, impliquée dans le mécanisme d'Orowan. La prise en compte de l'anisotropie est apparue un peu plus tard [109,110].

Les calculs de DD à proprement parler n'ont fait leur apparition qu'au début des années 1990 [111]. L'idée ici est de simuler l'évolution *dynamique* des formes de dislocations sous chargement. Ces calculs nécessitent probablement une des plus grandes puissances de calcul en physique, ce qui explique leur apparition tardive. Il ne suffit plus dorénavant de calculer la forme d'équilibre ; il convient d'établir une prévision réaliste de la vitesse du segment en fonction de la contrainte effective. La loi de mobilité est donc cruciale en DD, sauf dans quelques cas où la vitesse de dislocation n'a pas d'impact significatif sur la propriété étudiée comme, par exemple, pour les coefficients d'interaction ou le durcissement d'Orowan.

## 4.2. Anisotropie et simulations DD

La plupart des codes de simulation DD actuels fonctionnent selon le principe de l'élasticité isotrope. Dans le fer, les constantes élastiques sont :  $C_{11} = 242$  GPa,  $C_{12} = 146$  GPa,  $C_{44} = 112$  GPa [112]. Le coefficient d'anisotropie est assez élevé :  $A = 2 C_{44}/(C_{11} - C_{12}) = 2,3$ . Nous sommes donc amenés dans nos simulations DD à réduire le nombre des constantes élastiques pour utiliser seulement le module de cisaillement  $\mu$  et le coefficient de Poisson  $\nu$ . La question qui se pose alors est de savoir quelles valeurs choisir ? Cette interrogation est souvent esquivée dans les discussions. Rappelons à ce propos que lorsque nous étudions une dislocation dans un plan donné, le choix peut être fait sans ambiguïté en conservant l'énergie de la dislocation vis et de la dislocation coin. Pour le fer, comme nous l'avons montré dans §2.4, ces valeurs sont :  $\mu = 62$  GPa et  $\nu = 0,49$ , dans les plans  $\{110\}$  ainsi que le plan  $\{112\}$ .

Mais lorsqu'une distribution tridimensionnelle de dislocations est à l'origine de la contrainte locale (cas général en DD), la situation s'avère alors plus complexe. Le débat se situe entre la moyenne de Voigt (à déformation homogène), selon laquelle:  $\mu = C_{44} - H/5$ , où  $H = 2C_{44} + C_{12} - C_{11}$  et la moyenne de Reuss (à contrainte homogène) selon laquelle:  $\mu^{-1} = S_{44} + 4/5 J$ , où  $J = S_{11} - S_{12} - \frac{1}{2} S_{44}$  [68]. L'hypothèse de Voigt conduit à  $\mu = 86$  GPa et  $\nu = 0,29$ , alors que

celle de Reuss donne  $\mu = 73$  GPa et  $\nu = 0,42$ . La différence n'est pas négligeable lorsqu'on sait que la tension de ligne et l'énergie de dislocation sont proportionnelles à ces modules. Hirth et Loth [68] proposent d'adopter l'hypothèse de déformation constante près des dislocations. Mais les résultats récents de Han et al. [113] montrent que, concernant le champs d'une boucle, l'interaction dipolaire et la formation de jonction, les modules effectifs de Bacon et al. [54,109], suivis de près par les modules de Reuss, sont ceux qui reproduisent le mieux les résultats DD obtenus dans le cadre de l'élasticité anisotrope. Dans ce travail, les premiers calculs DD ont été effectués avec les modules effectifs de Voigt :  $\mu = 86$  GPa et  $\nu = 0.29$ . Par la suite, nous avons retenus les modules effectifs de Bacon et a. :  $\mu = 63$  GPa et  $\nu = 0.48$ .

### 4.3. Lois de mobilité

Nous pouvons distinguer deux formes de lois de mobilité, généralement utilisées en DD.

#### 4.3.1. Mobilité visqueuse dans le régime athermique

Comme le montrent les Fig. 12 et Fig. 14, la friction du réseau sur les dislocations coin et vis devient négligeable à une température supérieure, respectivement à 100 K et 300 K. A température ambiante et au-delà, la dislocation se déplace presque librement dans le fer quel que soit son caractère. Nous parlons alors d'un *régime athermique*. Dans un tel régime, l'expérience [114] et la théorie [115] prédisent une proportionnalité entre la vitesse de la dislocation et la cission effective. Osetsky et al. [37] ont vérifié cela en DM pour différentes températures et différentes longueurs de la dislocation coin {110} (voir Fig. 19).

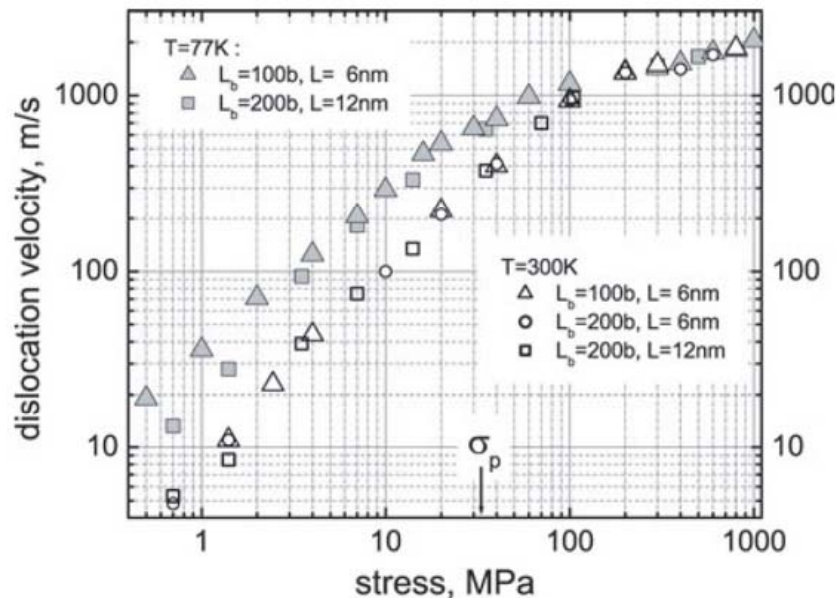


Fig. 19: vitesse de la dislocation à 77 et 300 K en fonction de la cission appliquée (reproduite à partir de [37])

En effet, tant que la vitesse  $v$  n'est pas proche de la vitesse du son, la viscosité est valide. Dans la Fig. 19, on constate facilement que la proportionnalité est valable jusqu'à plusieurs



centaines de m/s. de la figure ; nous en déduisons  $v = 10^5 \tau$ . Le coefficient de frottement  $B$  étant défini par l'équation. :

$$v = \frac{b}{B} \tau, \quad (4.1)$$

nous obtenons la valeur de  $B = 2.5 \times 10^{-5}$  Pa.s, ce qui est très proche des valeurs constatées dans les matériaux CFC [116]. Par ailleurs, nous avons évalué par DM [47] le coefficient  $B$  à  $3 \times 10^{-5}$  Pa.s pour le mouvement d'un décrochement le long d'une dislocation coin  $\{112\}$ . Ce décrochement n'a pas la faible mobilité des dislocations vis. Nous en déduisons qu'un décrochement sur une dislocation coin n'est pas de caractère vis et que la loi de viscosité s'applique également sur les décrochements.

### 4.3.2. Mobilité activée thermiquement

Nous avons vu que, dans le régime thermique, la loi d'Arrhenius s'applique pleinement en simulation DM du mouvement de la dislocation vis. A une température donnée  $T$ , si le segment  $i$  était isolé, sa vitesse  $v_i$  dépendrait uniquement de sa longueur  $l_i$  et de la contrainte effective  $\tau$ . L'expression de  $v_i$  est alors simplement :

$$v_i = 2 v_D \left( \frac{b}{l_c} \right)^2 l_i \exp\left( -\frac{\Delta G_o}{kT} \right) \sinh\left( \frac{\Delta G_o}{kT} \sqrt{\frac{\tau_i}{\tau_o}} \right) = l_i \eta_i \quad (4.2)$$

où  $l_c$  est la longueur critique du double-décrochement, prise égale à  $10b$ . Si, pour simplifier, nous considérons la constante  $H = v_D \times (b/l_c)^2$ , celle-ci correspond à une fréquence d'attaque effective de l'ordre de  $v_D/100 \approx 10^{+11} \text{ s}^{-1}$  dans le fer. Notons que nous avons modifié la forme initiale de la loi d'Arrhenius en cosinus hyperbolique afin de tenir compte de la probabilité de saut inverse [117]. Afin de séparer la dépendance en longueur et en température, nous avons défini dans l'équation 4.2, la vitesse par unité de longueur  $\eta_i$ .

La question qui se pose à nous maintenant est de savoir, compte tenu de la discrétisation en segments, comment traduire cette loi en DD ? L'équation 4.2 n'est pas conservative : la vitesse effective d'une section de dislocation vis discrétisée en plusieurs segments serait proportionnelle à l'inverse du nombre de ces segments, ce qui est numériquement inacceptable.

La procédure que nous avons adoptée consiste tout d'abord à déterminer le caractère de tous les segments voisins d'un segment vis afin d'identifier la longueur physique de la même section de caractère vis. Dans le cas où le segment  $i$  fait partie d'une section vis de  $n$  segments, la vitesse du segment  $i$  dépend de la longueur totale de la section. Si tous les segments sont soumis à la même contrainte effective, la vitesse effective  $v_{eff,i}$  du segment  $i$  sera :

$$v_{eff,i} = v_i + \sum_{j=1}^n v_j = \eta_i \sum_{j=1}^n l_j \quad (4.3)$$

La formulation dans l'équation 4.3 reproduit donc la proportionnalité à la longueur. Mais, dans la plupart des cas, la contrainte effective varie le long de la ligne. Dans ce cas, les segments soumis à une forte contrainte doivent se déplacer plus vite que la moyenne, tout en intégrant la probabilité de saut sur les autres segments. Il s'agit d'un problème complexe, dont

l'issue n'est pas certaine du point de vue théorique. En effet la loi d'Arrhenius modifiée dans l'équation 4.2 n'est pas valable lorsque la contrainte varie le long de  $l_i$ .

Afin de résoudre ce problème, nous avons adopté un traitement simplifié qui donne une bonne approximation de  $v_{eff,i}$ . D'abord, pour chaque segment  $i$ , nous calculons sa vitesse  $v_i$  en fonction de sa longueur et de sa contrainte effective. Puis, nous ajoutons à chaque  $v_i$  une contribution moyenne associée à l'ensemble des segments de la section vis. Cette contribution additionnelle est définie comme la somme des vitesses, pondérée par le facteur  $n/(n+1)$ . Ainsi, la vitesse effective  $v_{eff,i}$  s'exprime comme suit :

$$v_{eff,i} = v_i + \frac{n}{n+1} \left( \sum_{j=1}^{n+1} v_j \right) \quad (4.4)$$

On vérifie aisément qu'une telle formulation conduit à la proportionnalité à la longueur lorsque la contrainte est homogène et que la vitesse effective de la section vis est indépendante du nombre de segments la formant.

### 4.3.3. Comment rendre compte des différentes mobilités ?

A température inférieure à l'ambiante, la mobilité des dislocations vis est activée thermiquement, alors que celle des autres caractères ne l'est pas. Comment gérer cette différence dans un code DD ? En effet, à la contrainte critique, nécessaire pour le déplacement des dislocations vis à la vitesse imposée, les autres dislocations se déplacent très rapidement. Probablement, à une vitesse au-delà de la limite de validé de la mobilité visqueuse. Il est très difficile de gérer numériquement des vitesses de l'ordre de 1000 m/s pour les dislocations non-vis en même temps que des vitesses de l'ordre de  $\mu\text{m/s}$  pour les dislocations vis, dans les conditions habituelles de déformation.

Cependant, si nous nous rappelons que, dans ces conditions, la plasticité est contrôlée par la mobilité des dislocations vis et que les autres dislocations doivent se déplacer beaucoup plus rapidement, nous pouvons faire l'approximation suivante. Pour commencer, il suffit de considérer que la vitesse des dislocations non-vis est donnée par la même loi précisée dans l'équation 4.2 amplifiée par un facteur  $K \gg 1$ . Tout l'enjeu est de vérifier si la valeur de  $K$  influence les résultats. Les multiples études de sensibilité réalisées dans la thèse de Naamane [118] confirment qu'à exception de quelques cas particuliers, la limite d'écoulement ne dépend pas fortement de la valeur du coefficient  $K$ .

## 4.4. Durcissement de la forêt dans le régime athermique

En dehors des études de cartographie de jonctions [119,120], dont l'intérêt est surtout "académique", la représentation fiable, du point de vue statistique, de l'interaction entre les systèmes de glissement reste l'identification des coefficients d'interaction. Une présentation complète de ces coefficients avec une discussion approfondie se trouvent dans la thèse de Madec [121]. Lorsque toutes les dislocations se déplacent selon une loi visqueuse classique, l'identification de ces coefficients est relativement simple, grâce aux simulations de l'écrouissage latent. Celles-ci consistent à prendre au hasard un système de glissement, considéré comme le système actif ou mobile, et à étudier son interaction avec chacun des autres systèmes non chargés mécaniquement. Ce type de simulations est naturellement quasi-

statique, c'est-à-dire consiste à rechercher systématiquement des états d'équilibre de l'ensemble des dislocations sous contrainte.

#### 4.4.1. Les systèmes de glissement dans le fer

Dans la matrice CC, nous avons douze systèmes de glissement de type  $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \{ \bar{1}10 \}$  et 12 systèmes de glissement de type  $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \{ \bar{1}\bar{1}2 \}$ . Une zone d'axe  $[111]$  est constituée donc de trois plans de types  $\{110\}$  et trois plans de type  $\{112\}$ . La dislocation vis dispose d'une multitude de choix pour dévier. Compte tenu du débat actuel sur l'activité des plans  $\{112\}$  et le manque de données les concernant, seuls les plans  $\{110\}$  ont été considérés dans nos simulations DD. L'idée était de caractériser d'abord les systèmes principaux avec les plans  $\{110\}$ . Le Tableau 1 indique les indices utilisés dans ce mémoire pour désigner ces systèmes de glissement.

Indice	Plan	$\bar{b}$	Indice	Plan	$\bar{b}$
1	(110)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	7	$(\bar{1}\bar{1}0)$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
2	$(\bar{1}01)$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	8	(101)	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
3	$(0\bar{1}\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$	9	$(01\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$
4	$(0\bar{1}1)$	$[111]$	10	$(1\bar{1}0)$	$[11\bar{1}]$
5	$(10\bar{1})$	$[111]$	11	$(\bar{1}0\bar{1})$	$[11\bar{1}]$
6	$(\bar{1}10)$	$[111]$	12	(011)	$[11\bar{1}]$

Tableau 1: indices des systèmes de glissement de plans  $\{110\}$ .

Compte tenu de la symétrie CC, nous observons seulement six interactions différentes (voir le Tableau 2). L'interaction entre le système et lui-même est qualifiée de dipolaire en raison de la formation fréquente de dipôles dont la nature de l'interaction est purement élastique.

Interaction	coefficient	Systèmes	$\bar{l}_j$	$\bar{b}_j$	$\theta_1$	$\theta_f$	$\varphi$
Dipolaire	$\alpha_{dip}$	1					
Colinéaire	$\alpha_{col}$	2, 3	$[1\bar{1}1]$	$\bar{0}$			
J. mixte symétrique	$\alpha_{sym}$	4, 11	$[\bar{1}11]$	$[0\bar{1}0]$	70,5	70,5	54,7
J. mixte asymétrique	$\alpha_{asym}$	5, 8, 9 et 12	$[1\bar{1}1]$	$[0\bar{1}0]$	0	70,5	54,7
J. coin	$\alpha_{coin}$	6, 10	$[001]$	$[0\bar{1}0]$	54,7	54,7	90
Coplanaire	$\alpha_{cop}$	7					

Tableau 2: caractéristiques géométriques des interactions entre le système n° 1 et les autres. De gauche à droite : nom de l'interaction, nom des coefficients, les systèmes impliqués, direction et vecteur de Burgers de la jonction, l'angle entre la direction de la jonction et le vecteur de Burgers du système de référence 1 ( $\theta_1$ ), angle entre la direction de la jonction et le vecteur de Burgers du système de la forêt ( $\theta_f$ ) et  $\varphi$  l'angle entre la direction de la jonction et son vecteur de Burgers (caractère).

Un seul système coplanaire est couplé à chaque système mobile. L'interaction est également de nature élastique. L'interaction colinéaire désigne celle entre les systèmes partageant le même vecteur de Burgers. Le résultat de cette réaction est l'annihilation mutuelle. Avec les autres systèmes, trois types de jonctions sont possibles.

Nous remarquons qu'il existe deux jonctions (mixte symétrique et asymétrique) fournissant la même nature de jonction (direction  $[0\bar{1}0]$  et vecteur de Burgers  $[1\bar{1}1]$ ). Pourtant, leur coefficients d'interaction ne sont, a priori, pas égaux en raison de la différence d'orientation entre le système mobile et la direction de jonction.

#### 4.4.2. Théorie de l'interaction entre systèmes de glissement

Selon la théorie classique de stabilité de jonction [71,122], pour qu'une dislocation ancrée par deux jonctions puisse se libérer, il faut que la courbure de la dislocation atteigne un seuil critique.

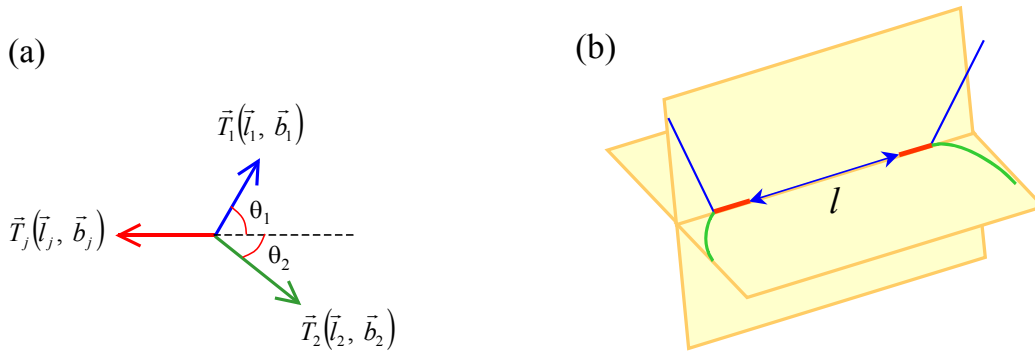


Fig. 20: (a) équilibre sur un nœud triple et (b) dislocation ancrée sous contrainte.

En effet, la règle d'équilibre autour des jonctions revient à imposer les conditions d'équilibre des nœuds triples, schématisée dans la Fig. 20(a). Cette condition fait intervenir les tensions de lignes  $T_i$  des deux dislocations (1 et 2) et de la jonction (j), mettant en jeu leurs directions et Vecteurs de ligne respectifs. L'équilibre s'exprime alors simplement par la relation :  $\vec{T}_j(\vec{l}_j, \vec{b}_j) = \vec{T}_1(\vec{l}_1, \vec{b}_1) + \vec{T}_2(\vec{l}_2, \vec{b}_2)$  avec la condition de conservation  $\vec{b}_j = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$ . Puisque nous considérons des dislocations rectilignes au voisinage du nœud, la deuxième dérivée de l'énergie par rapport au caractère, ne doit pas être incluse dans la formulation des tensions de ligne. En revanche, cette simplification conduit à négliger la première dérivée [66,67], c'est-à-dire le moment appliqué sur chaque segment tendant à le tourner vers la direction vis. L'équation d'équilibre se simplifie alors pour donner :

$$A_j b_j^2 \ln \frac{R_j}{r_j} = A_1 b_1^2 \ln \frac{R_1}{r_1} \cos \theta_1 + A_2 b_2^2 \ln \frac{R_2}{r_2} \cos \theta_2, \quad (4.5)$$

où  $A_i$  est un facteur dépendant du caractère de la dislocation  $i$  :  $A_i = (1 - \nu \cos^2 \beta_i) / [4\pi(1 - \nu)]$ , où  $\beta_i$  est le caractère de la dislocation, c'est-à-dire l'angle entre les vecteurs ligne et de Burgers.  $R_i$  et  $r_i$  sont les rayons de coupure extérieurs et intérieurs. La règle connue de la stabilité de jonction :  $b_j^2 < b_1^2 + b_2^2$ , n'est donc qu'une approximation intuitive. Ce que nous devons retenir de l'équation 4.5 est que lorsque la dislocation 1 se courbe,  $\theta_1$  varie, ce qui entraîne une variation de  $\theta_2$ , pour maintenir l'égalité dans l'équation 4.5. La jonction

commence à se défaire lorsque la courbure atteinte ne peut plus être accommodée afin de maintenir cette égalité.

L'équation 4.5 montre toute la complexité du traitement de jonctions dans le cas général. Même si nous considérons que pour toutes les dislocations les rayons extérieurs et intérieurs sont les mêmes (même  $R_i$  et même  $r_i$ ), nous n'avons aucune possibilité de suivre analytiquement la variation de  $\theta_2$  en fonction de  $\theta_1$ . Si, en outre, nous considérons le cas de plusieurs jonctions différentes, le problème devient impossible à résoudre (d'où la nécessité de faire des simulations DD). Mais, avant de montrer les résultats de la DD, nous allons essayer de "deviner" les paramètres importants du problème.

Si nous fixons la distance moyenne  $l$  entre les jonctions et si nous négligeons la variation de  $\theta_2$ , alors  $\theta_1$  devient une simple fonction de la courbure de la dislocation, schématisée dans la Fig. 20(b). L'équilibre de forces nous indique que lorsque  $\tau bl$  est supérieure à une valeur donnée, la jonction est défaite. Nous pouvons exprimer cela par :

$$\tau_{forêt} = f(b_i, \cos \theta_1, A_1, \cos \theta_2, A_2) \frac{\mu b}{l} \ln \frac{R}{r} \quad (4.6)$$

Dans une vraie microstructure, il existe de nombreuses jonctions avec différentes configurations géométriques. La fonction  $f(\cdot)$  rend compte des moyennes des paramètres géométriques de l'équation 2.5. La mesure de  $\tau_{forêt}$  devient principalement dépendante de  $b_j$  et de  $l$  (associée à la densité des dislocations forêt  $\rho_{forêt}$ ). Une deuxième remarque a été faite par Schoeck et al. [123], qui stipule que le rayon d'écrantage  $R$  doit également être une fonction de la densité des dislocations forêts  $\rho_{forêt}$ , puisque la courbure de la dislocation entraîne un écrantage efficace de son propre champ. En d'autres termes, la flexibilité des lignes de dislocations doit augmenter dans un environnement dense de dislocations. Le résultat des différentes approximations et moyennes s'écrit :

$$\tau_{forêt} = \beta \mu b \sqrt{\rho_{forêt}} \ln \frac{1}{\beta b \sqrt{\rho_{forêt}}}, \quad (4.7)$$

d'où le coefficient d'interaction  $\beta$ , qui ne doit être fonction que des deux systèmes en interaction, ce qui fixe la nature et la force de la jonction. La présence de  $\beta$  dans le terme logarithmique est nécessaire afin de tenir compte de la force de la jonction dans la courbure de la dislocation. Il est nécessaire ici de dissiper quelques malentendus. Remplacer  $l$  dans l'équation 4.6 par  $1/\sqrt{\rho_{forêt}}$  dans l'équation 4.7 ne signifie pas une égalité mais une simple proportionnalité. En aucun cas,  $\beta$  ne doit être confondu avec le cosinus d'un angle critique quelconque. Il s'agit d'une simple moyenne de la fonction  $f(\cdot)$  dans l'équation (25).

Dans certaines applications où la densité de forêt ne varie pas beaucoup, le terme logarithmique reste relativement constant et peut être incorporé dans la constante  $\beta$ . Le résultat est la formulation classique de la résistance de la forêt :

$$\tau_{forêt} = \alpha \mu b \sqrt{\rho_{forêt}}. \quad (4.8)$$

Naturellement, les valeurs numériques des deux coefficients  $\alpha$  et  $\beta$  diffèrent fortement. Lorsque Basinski et al. [124] et Hansen et al. [125] entreprirent de rassembler les données expérimentales reliant la contrainte d'écoulement à la densité des dislocations, ils ont clairement montré une évolution proche de la racine carré de la densité. Néanmoins, une

petite déviation est visible à haute densité. Madec et al. [126] furent les premiers à souligner cet aspect et à insister sur l'importance du terme logarithmique dans l'équation 4.7.

#### 4.4.3. Coefficients d'interaction dans le fer

Comme nous l'avons montré ci-dessus, le coefficient d'interaction entre deux systèmes de glissement est une moyenne complexe de plusieurs paramètres géométriques, comme l'orientation des lignes ou l'espacement entre jonctions, etc. Impossible à établir analytiquement, cette moyenne doit être réalisée numériquement au moyen de simulations DD. Les résultats de telles simulations sont *a priori* fonction de la microstructure simulée, ce qui conduit à une interrogation légitime concernant la validité de ces résultats. Si, par exemple, nous introduisons une forêt à fort caractère coin, nous introduisons un biais dans le calcul par rapport à une microstructure aléatoire. De même, si nous voulons estimer la résistance des parois de dislocations, connues pour être formées essentiellement de dislocations coin, les dislocations de la forêt ne doivent pas être distribuées aléatoirement, puisque les parois sont des structures à faible énergie. Les valeurs obtenues sont donc à prendre avec précaution en fonction du problème considéré.

Les coefficients d'interaction calculés le plus couramment sont ceux associés à une microstructure de référence d'un matériau faiblement écroui. Dans ces conditions, la restauration reste limitée et le caractère des dislocations est relativement aléatoire. Dans le régime athermique, la mobilité des dislocations du système actif est très peu sensible au caractère et peut être décrite par une loi visqueuse. Dans ces conditions, faciles à reproduire en simulations DD, nous pouvons entreprendre des simulations de l'écrouissage latent pour déterminer les coefficients.

Mais, même en fixant ces conditions, le coefficient  $\alpha$  ou  $\beta$  sont fonction de  $\theta_2$ , c'est-à-dire de la flexibilité des dislocations de la forêt. En effet, si cette dislocation est très courte, la courbure nécessaire pour la formation de la jonction devient difficile, ce qui diminue, en moyenne, la force des jonctions et, par conséquent, le coefficient. Par ailleurs, si nous augmentons fortement la vitesse de déformation, c'est-à-dire la vitesse moyenne des dislocations, le temps d'immobilisation et de courbure de la dislocation en contact avec les jonctions doit diminuer, ce qui conduit également à l'affaiblissement des jonctions. Afin de mettre en place des simulations pour déterminer les coefficients, il convient donc de faire une étude de sensibilité du coefficient mesuré à ces paramètres. Dans la thèse de Queyreau [10], nous avons entrepris une campagne de simulations pour caractériser complètement la sensibilité des coefficients à tous les paramètres influents sur les valeurs des coefficients. Nous montrons dans la Fig. 21 deux cas emblématiques des conditions de simulations pour la détermination du coefficient de la jonction symétrique : la longueur des arbres de la forêt et la vitesse de déformation.

Deux conclusions peuvent en être tirées. La force de la jonction reste relativement stable jusqu'à une longueur des dislocations forêt de l'ordre de 4 fois l'espacement moyen de ces dislocations. En deçà de cette limite, la stabilité des jonctions diminue en raison de la rigidité des dislocations de la forêt. Par exemple, à  $10^{14} \text{ m}^{-2}$  de densité forêt, cette limite est de  $0,4 \mu\text{m}$ . Par ailleurs, l'influence de la vitesse de déformation se montre très faible, voire inexistante. Il faut signaler que les simulations ont été réalisées avec une densité mobile de  $10^{13} \text{ m}^{-2}$ . La relation d'Orowan nous donne une vitesse moyenne des dislocations de l'ordre de  $0,4 \text{ m/s}$ . La Fig. 21 nous confirme qu'entre  $0,2$  et  $4 \text{ m/s}$  de vitesse moyenne, la valeur obtenue du coefficient est insensible à la vitesse. Nous avons ici un aperçu des précautions habituelles

à prendre pour réaliser des simulations DD. En effet, la multitude des paramètres de simulation et de la microstructure initiale rend cette technique "délicate" à manipuler pour le néophyte.

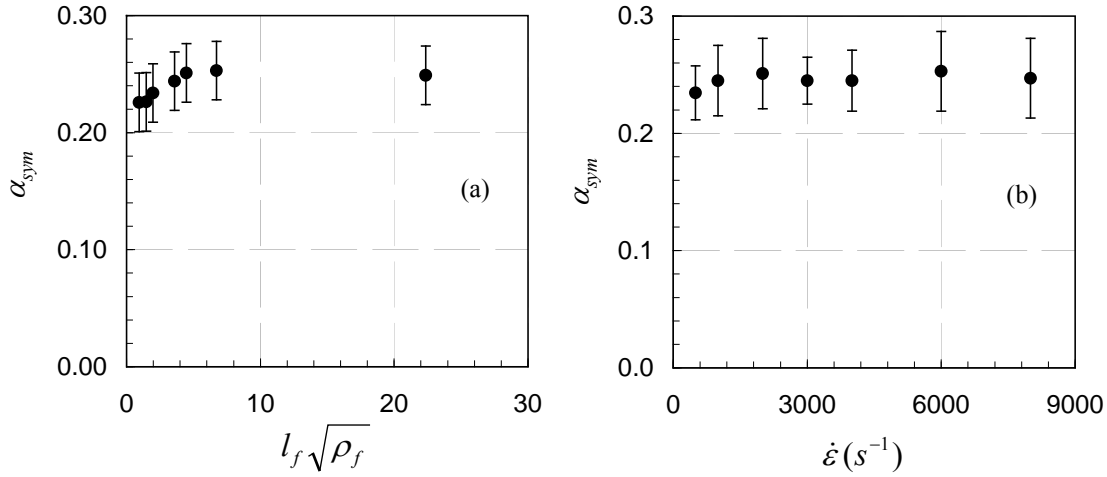


Fig. 21: (a) effet de la longueur des dislocations forêt normalisée par leur espacement moyen.

Afin d'incorporer le terme logarithmique de l'équation 4.7 dans l'expression de la résistance de la forêt  $\tau_{forêt}$ , tout en gardant l'ordre de grandeur des coefficients de l'équation 4.8, nous pouvons redéfinir le coefficient  $\beta$  de la manière suivante :

$$\tau_{forêt} = \mu b \frac{\ln(b\sqrt{\beta\rho_{forêt}})}{\ln(b\sqrt{\beta\rho_{ref}})} \sqrt{\beta\rho_{forêt}}, \quad (4.9)$$

où  $\rho_{ref}$  désigne la densité de dislocations forêt à laquelle les simulations de l'écroissage latent ont été réalisées. Ainsi, si la densité de dislocations est du même ordre de grandeur que celle de  $\rho_{ref}$ , nous pouvons écrire simplement :

$$\tau_{forêt} = \mu b \sqrt{\beta\rho_{forêt}}. \quad (4.10)$$

Cette forme est équivalente à celle de l'équation 4.8 et permet d'isoler, lorsque la densité de dislocations ne varie pas fortement, toute l'information liée à la résistance de la forêt dans le terme  $\alpha$  où  $\beta$ . Les valeurs trouvées dans nos simulations sont listées ci-après dans le Tableau 3.

Réaction	Dipolaire et coplanaire	J. mixte symétrique	J. mixte asymétrique	J. coin	Colinéaire
Coefficient $\beta$	0,007	0,063	0,036	0,039	0,53
Coefficient $\alpha$	0,08	0,25	0,2	0,2	0,73

Tableau 3: valeurs des coefficients pour les différentes interactions entre systèmes de glissement. La densité de dislocations de référence est de  $2 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$ .

Comme montré dans la thèse de Queyreau [10], ces coefficients ont été obtenus suivant une procédure qui permet d'isoler l'interaction dipolaire des autres interactions [127]. En effet, lors de l'interaction avec une forêt, les dislocations mobiles réagissent entre elles. Cette réaction n'est pas toujours négligeable.

Par rapport à la résistance classique d'Orowan  $\tau_{max} = \mu b/l$ , les dislocations constituent des obstacles relativement forts pour les autres dislocations. A l'exception des précipités,  $\alpha$  est plutôt de l'ordre de quelques pourcents. C'est le cas, par exemple, de l'interaction avec des atomes en solution substitutionnelle (nickel dans l'aluminium) [128] et même interstitielle (carbone dans le fer) [98].

Plusieurs remarques peuvent être formulées concernant les coefficients du Tableau 3 :

- (i) les résistances dipolaires et coplanaires ont presque la même force. Les dislocations glissant dans des plans parallèles ne peuvent interagir qu'à longue distance. Sans contact possible, ces réactions ne sont *a priori* pas bien décrites par l'équation 4.9. Mais la force d'attraction/répulsion diminue en  $1/r$ , avec  $r$  la distance par rapport à la dislocation. Par conséquent, nous pouvons continuer à utiliser l'équation 4.9 même si il ne s'agit pas à proprement parler de *dislocations de forêt*.
- (ii) Les trois types de jonctions ont une résistance assez proche, mais qui reste, à l'exception de la jonction de Hirth, inférieure à celle des jonctions dans la structure CFC. Ceci va dans le sens des observations expérimentales sur l'écroutissage des monocristaux, plus faible dans la structure CC [129].
- (iii) Comme dans le cas de la structure CFC, l'interaction colinéaire reste largement supérieure à toutes les autres [130]. En effet, l'annihilation colinéaire conduit à un fort ancrage des dislocations. La résistance correspondante doit être proche, voire plus élevée, qu'un précipité infranchissable d'Orowan.

#### 4.4.4. Effet de la friction alliage sur les coefficients

Dans le cas où la solution solide se traduit par un seuil uniforme de contrainte  $\tau_f$  en-dessous de laquelle le glissement est impossible, nous pouvons nous interroger sur l'effet de  $\tau_f$  sur les coefficients d'interaction. Cet aspect est resté sous silence pendant longtemps, en raison d'une idée fautive : puisque la résistance est uniforme, la contrainte critique due au franchissement de la forêt doit être décalée tout simplement par  $\tau_f$ , ce qui ne doit pas se traduire par une modification de la résistance intrinsèque de la forêt.

Dans [97], nous avons expliqué que ce n'est pas tout à fait correct. La façon dont  $\tau_f$  influence  $\alpha$  est, en effet, subtile. Afin d'illustrer cet effet, nous montrons dans la Fig. 22 un schéma de l'interaction colinéaire sous forte friction et chargement nul. Le choix de cette interaction se justifie par la simplicité de l'interaction conduisant à un vecteur de Burgers nul (annihilation). Les deux dislocations droites se croisent au départ au point I, situé sur l'axe d'intersection des deux plans de glissement.

En l'absence de friction, si les deux dislocations sont attractives, la relaxation finale s'étend jusqu'aux points E et F, de telle sorte que les deux dislocations minimisent totalement la somme de leurs longueurs tout en restant attachées l'une à l'autre le long de l'axe d'intersection.



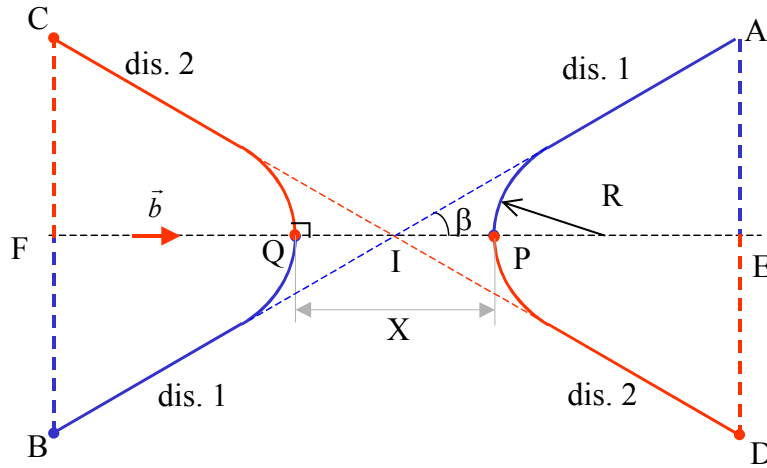


Fig. 22: schéma de l'interaction colinéaire en présence d'une forte friction d'alliage sans chargement.

Rien n'oblige les dislocations à rester proches du point initial  $I$ . Cette large relaxation est à l'origine de la forte résistance colinéaire. Maintenant, supposons que les dislocations subissent une forte friction d'alliage  $\tau_f$ . Deux conséquences sont prévisibles :

- (i) loin de l'intersection  $I$ , nous pouvons penser que la force motrice de la réaction n'est pas suffisante pour vaincre la friction ; la dislocation doit rester rectiligne.
- (ii) (ii) au point de contact, en revanche, l'équilibre des lignes de dislocations nécessite que chacune fasse un angle droit avec l'axe d'intersection aux points  $P$  et  $Q$  (voir l'équilibre du point triple dans la Fig. 20).

Par conséquent, comme le montre la Fig. 22, il existe une zone intermédiaire où la dislocation doit se courber pour satisfaire (i) et (ii). Au-delà de cette description mécanique et phénoménologique, la physique peut nous aider à quantifier cette courbure. Afin d'avoir une idée de l'ordre de grandeur du rayon de courbure, nous pouvons suivre le raisonnement suivant. Supposons une dislocation ancrée de courbure uniforme. En l'absence de friction et de chargement, la dislocation se relaxe en faisant disparaître sa courbure pour s'aligner entre les deux points d'ancrage.

Si maintenant la dislocation est sous un chargement  $\tau$ , la dislocation ne peut pas revenir complètement à cet état. Elle gardera une courbure d'équilibre  $R$ , donnée par  $T/(b\tau)$ , où  $T$  est la tension de ligne. En toute rigueur, nous devons considérer dans cette tension de ligne la deuxième dérivée de l'énergie par rapport au caractère [55]. Mais, comme nous sommes seulement intéressés par l'ordre de grandeur de  $R$ , nous considérons une simple tension de ligne  $\frac{1}{2}\mu b^2$ . Après simplification, nous obtenons  $R = \mu b/\tau$ . Le résultat serait exactement le même si, à la place du chargement  $\tau$ , nous avons une friction de même amplitude  $\tau_f = \tau$ . Par conséquent, le rayon de courbure dans la Fig. 22, serait donnée par  $R_f = \mu b/\tau_f$ . Il est maintenant facile d'évaluer la longueur de relaxation  $x$  (voir Fig. 22) [97] :

$$x = \left[ \frac{2 \tan((\pi - 2\beta)/4)}{\tan(\beta)} - \frac{4\nu}{1-\nu} \right] \frac{\mu b}{\tau_f}. \quad (4.11)$$

La longueur de relaxation est proportionnelle au rayon de courbure, c'est-à-dire à l'inverse de la friction  $\tau_f$ . La prévision de l'équation 4.11 s'accorde bien avec les résultats DD [97],

confirmant la validité de notre approche. Le traitement de jonction conduit à la même proportionnalité.

En présence du chargement, le traitement devient beaucoup plus complexe, en raison du double rôle de la contrainte sur la relaxation. En effet, la contrainte tend à accentuer la relaxation sur un bras et à la diminuer sur l'autre bras. En outre, en fonction du rapport des facteurs de Schmid sur les deux systèmes, l'évolution de l'interaction peut être complètement différente, comme le montre la Fig. 23.

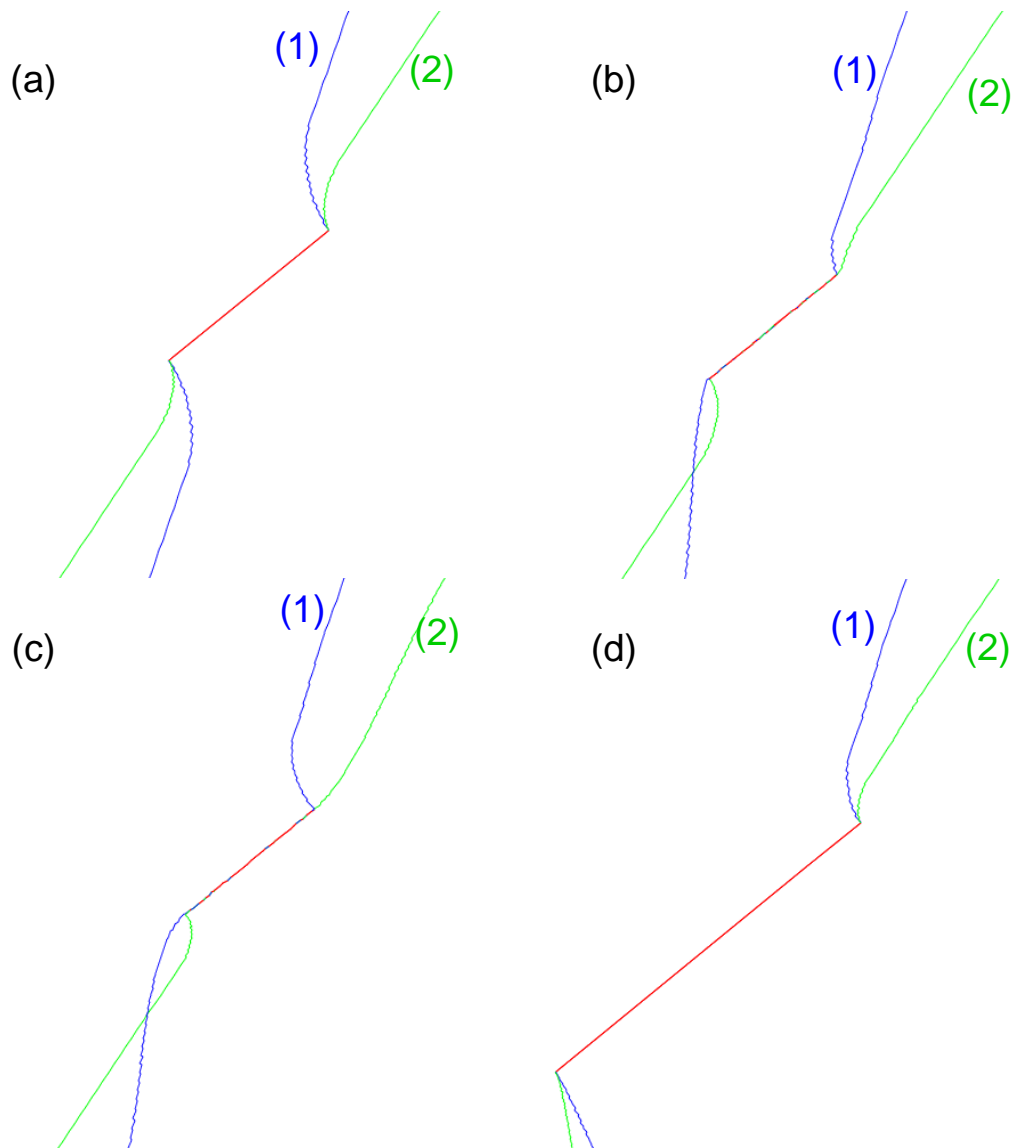


Fig. 23: évolution de la jonction mixte sous chargement  $\tau = \tau_f$  en fonction des facteurs de Schmid ( $m_i$ ) sur les systèmes (1) et (2). (a)  $m_1 = 0, m_2 = 0$  ; (b)  $m_1 = 0,5, m_2 = 0$  ; (c)  $m_1 = 0,5, m_2 = -0,5$  ; (d)  $m_1 = 0,5, m_2 = 0,5$ .

Même dans le cas simple où un seul système est sollicité, la résolution de l'équation d'équilibre des nœuds triples ne peut être faite analytiquement.

Comme tendance générale, nous avons montré [97] que l'effet de la friction sur la force de la jonction diminue lorsque la longueur des bras de dislocations baisse, c'est-à-dire avec l'augmentation de la densité des dislocations forêt. Au cours de la déformation, l'effet de  $\tau_f$  ne peut donc que diminuer.

Si, à friction d'alliage nulle, le désancrage survient à la contrainte critique  $\tau_{forêt,0} = \alpha_o \mu b \sqrt{\rho_{forêt}} = \mu b / R_c$ , cela induit alors une courbure critique  $C_c = 1/R_c$ , où  $R_c$  est le rayon de courbure critique. La contrainte critique est donnée par  $\tau_{forêt,0} = \mu b C_c$ . La question se pose alors de savoir comment déduire  $C$  (à friction non nulle) de  $C_c$  ? Compte tenu des nombreux paramètres intervenant dans le rôle de  $\tau_f$ , nous considérons l'approche approximative suivante.

Si la friction d'alliage est non nulle et le chargement nul, seules les sections proches des nœuds triples acquièrent une courbure  $C_f = 1/R_f = \tau_f / \mu b$ , les autres sections restant droites, comme indiqué dans la Fig. 22.

Si maintenant, nous chargeons le système avec  $\tau > \tau_f$ , les segments éloignés des jonctions commencent à acquérir une courbure  $C_{app} = (\tau - \tau_f) / (\mu b)$ , induisant dans le même temps une rotation des sections déjà courbées au voisinage des nœuds triples d'un angle approximativement proportionnel à  $C_{app}$ . Le désancrage survient lorsque la courbure totale aux nœuds triple, c'est-à-dire  $C_{app} + C_f$ , devient égale à la courbure critique  $C_c$ . Ceci se traduit par :

$$\tau_c = \tau_f + \tau_{forêt} = \tau_f + \alpha \mu b \sqrt{\rho_{forêt}} \quad (4.12)$$

Nous avons donc :

$$\frac{1}{R_c} = \frac{1}{R} + \frac{A}{R_f}, \quad (4.13)$$

où  $A$  est une constante exprimant la proportionnalité entre l'accroissement de la courbure locale au nœud triple dû à la courbure provoquée par la friction d'alliage  $\tau_f$ . En remplaçant les rayons de courbure par leurs valeurs, nous obtenons :

$$\frac{\tau_{forêt,0}}{\mu b} = \frac{\tau_{forêt}}{\mu b} + A \frac{\tau_f}{\mu b}, \quad (4.14)$$

En se rappelant des définitions de  $\alpha$  et  $\alpha_o$ , nous avons donc :

$$\alpha = \alpha_o - \frac{A}{\mu b \sqrt{\rho_{forêt}}} \tau_f \quad (4.15)$$

A microstructure égale, notre modèle – très simple – prédit une diminution du coefficient d'interaction proportionnelle à la friction d'alliage. Dans la Fig. 24, nous montrons l'évolution du coefficient d'interaction de la jonction Lomer en fonction de la friction d'alliage.

La figure montre clairement que la variation du coefficient est linéaire, proche de nos prévisions de l'équation 4.15. Pour les faibles valeurs de la friction, la correspondance est très bonne avec l'équation 4.15 (voir Fig. 24). Pour les valeurs élevées, l'évolution de  $\alpha$  s'écarte de la tendance linéaire. L'explication réside certainement dans l'invalidité de l'approximation liant la courbure à l'angle de rotation.

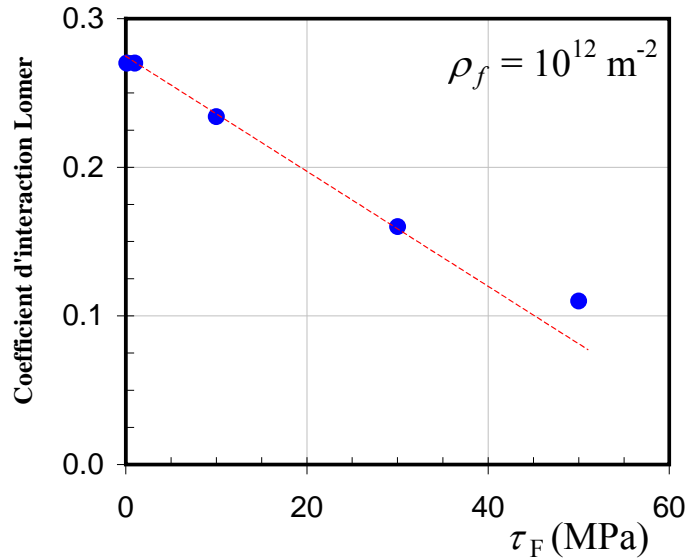


Fig. 24 : évolution du coefficient d'interaction (cercles) de la jonction de Lomer dans la structure CFC en fonction de la contrainte de friction. La droite pointillée représente le lissage linéaire de l'équation 4.15 pour les faibles valeurs de la friction.

L'effet de la friction sur la force des jonctions est très fort et ne peut être négligé que lorsque la densité de dislocations est très élevée [97].

## 4.5. Durcissement d'Orowan dans le régime athermique

### 4.5.1. Aperçu théorique

Lorsqu'une dislocation mobile rencontre un précipité incohérent, c'est-à-dire n'offrant pas de continuité cristallographique du plan de glissement, ou un précipité cohérent dont la taille dépasse un seuil critique, la dislocation contourne cet obstacle selon le mécanisme d'Orowan. Depuis la découverte de celui-ci en 1948 [131], de nombreuses tentatives ont été réalisées afin de prendre en compte deux aspects, absents du traitement initial d'Orowan : la taille des particules [108,109,132] et l'effet de la distribution [71,133,134]. En effet, selon Orowan [131], le durcissement correspondant est de l'ordre de :

$$\tau_o = \frac{\mu b}{l}, \quad (4.16)$$

où  $l$  est l'espacement moyen des précipités. L'établissement de l'équation 4.16 nécessite implicitement deux hypothèses fortes. D'abord, la tension de ligne doit être de la forme  $\frac{1}{2}\mu b^2$  ; ensuite, l'espacement des obstacles ancrant la dislocation est égal à l'espacement moyen surfacique des obstacles. Dans cette deuxième hypothèse, la distribution dans les matériaux réels, presque toujours plus au moins aléatoire, est entièrement négligée. Bacon, Kocks et Scattergood (appelés dans la suite BKS) [108], ont été les premiers à souligner un aspect supplémentaire : l'influence de la taille des obstacles sur la tension de ligne de la dislocation.

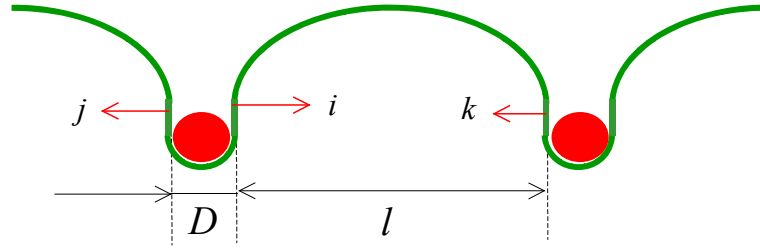


Fig. 25: configuration critique d'une dislocation réagissant avec une rangée périodique de particules.

Dans le cas d'une rangée périodique de particules de taille  $D$  et espacées de  $l$  (voir Fig. 25), le durcissement selon BKS [108] est :

$$\tau_{BKS} = \frac{1 - \nu \cos^2 \theta}{2\pi(1 - \nu)} \frac{\mu b}{l} \left( \ln \frac{D}{b} + B \right), \quad (4.17)$$

où  $\theta$  est l'angle caractéristique du segment de type  $i$  dans la Fig. 25,  $\underline{D}$  est la moyenne harmonique de  $l$  et de  $D$ , c'est-à-dire  $(Dl)/(D+l)$ , et  $B$  est une constante égale à 0,7. Étonnamment, la présence de la constante  $B$  n'a pas été commentée par les auteurs, alors qu'elle correspond à  $(\ln 2)$ . Ceci revient à considérer, tout simplement, que le rayon d'écrantage inférieur  $r_o$  dans leurs simulations n'est pas de  $b$  mais de  $b/2$ . Cette valeur s'accorde très bien avec les résultats de simulations atomiques (voir Fig. 4), mais la raison de son apparition dans ce type de simulations mésoscopiques nous reste encore inconnue. Par ailleurs, si nous intégrons cette correction dans l'équation 4.17, nous pouvons déduire l'expression de la tension de ligne  $T_l$  du segment  $i$ . En effet, l'énergie supplémentaire correspondant à une elongation  $dx$  du segment  $i$  – et par conséquent du segment  $k$  – doit être égale au travail de la contrainte appliquée, ce qui permet d'écrire  $(\tau_{BKS} b l) = 2T_l$ . Avec l'équation 4.17, nous avons :

$$T_l = \frac{1 - \nu \cos^2 \theta}{4\pi(1 - \nu)} \mu b^2 \left( \ln \frac{2D}{b} \right). \quad (4.18)$$

Cette tension de ligne correspond à l'énergie par unité de longueur d'une dislocation appartenant à un dipôle. Ainsi, puisque le travail consiste à une pure elongation, la deuxième dérivée de l'énergie par rapport au caractère n'intervient pas ici. Dans cette équation, la portée du champ de la dislocation est réduite à  $\underline{D}$ , c'est-à-dire à environ la taille de la particule. Même dans un terme logarithmique, cette réduction n'est pas négligeable. L'attraction dipolaire entre les segments  $i$  et  $j$  est donc à l'origine de la diminution de la force des particules. Selon BKS [108], la taille de la particule induit une forte modification de la tension de ligne de la dislocation.

En comparaison, il en résulte que le durcissement classique d'Orowan de  $\tau_o$  pour une rangée périodique ne correspond au durcissement de l'équation 4.17 que lorsque  $\underline{D}$  est de l'ordre de  $75 b$ . Dans la plupart des cas,  $l \gg \underline{D}$ , ce qui indique que le durcissement de  $\tau_o$  est valable pour des particules de diamètres proches de 20 nm. Pour les particules de dimensions inférieures, comme les défauts d'irradiation, le durcissement d'Orowan est largement inférieur à  $\tau_o$ . Il est étonnant de constater que la tension de ligne d'Orowan ( $\frac{1}{2} \mu b^2$ ), prédite il y a 60 ans, correspond à une moyenne réaliste de tailles de précipités en métallurgie (pour une revue voir [135]).

Bien entendu, cette conclusion ne porte que sur le cas d'une rangée périodique, équivalente à une distribution "carrée" des particules. La distribution réelle est toujours plus ou moins aléatoire ce qui conduit à une deuxième baisse du durcissement. Mais cette baisse est plus difficile à cerner que celle due à la taille des particules. Les différents modèles statistiques ne permettent pas de prendre en compte les résultats des simulations DD [6]. Là aussi, BKS [108] ont proposé une approche originale. En remarquant que le durcissement prévu dans l'équation 4.17 est généralement inférieur à  $\tau_o$ , ils ont conclu, à juste titre, que pour une tension de ligne classique le durcissement de l'équation 4.17 serait faible. Les particules peuvent alors être assimilées à des obstacles ponctuels franchissables, caractérisées par une force  $\alpha$  et un angle critique  $\theta$  donné par  $\alpha = \cos \theta = \tau_p / \tau_o$ . BKS [108] déduisent que les statistiques de Friedel [71] s'appliquent, conduisant à exprimer finalement le durcissement d'Orowan pour une distribution aléatoire ainsi :

$$\tau_p = \sqrt{\frac{\ln D}{\ln l}} \frac{\mu b}{l} \left( \frac{\ln D}{2\pi} \right) \quad (4.19)$$

Comme nous pouvons le remarquer, l'influence de l'attraction dipolaire et de l'aspect aléatoire de la distribution sur le mécanisme d'Orowan se traduit par une diminution de la force effective des particules  $\alpha$  de 1 à la valeur :

$$\alpha = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{(\ln D)^3}{\ln l}} \quad (4.20)$$

Ainsi, la dureté effective des particules dans le mécanisme d'Orowan augmente avec la taille des particules et diminue avec leur espacement. Rappelons que ces résultats ne sont valables que lorsque  $\underline{D} < 75 b$ , afin de garantir que les particules sont assez faibles pour l'application des statistiques de Friedel.

#### 4.5.2. Résultats des simulations DD

Tout d'abord, les résultats de la thèse de Queyreau [10] ont confirmé la validité de l'équation 4.17, dont la prédiction est tracée en ligne continue dans la Fig. 26. Que ce soit pour la dislocation vis ou coin, les résultats des simulations DD s'accordent parfaitement avec le modèle sur au moins deux ordres de grandeur en  $\underline{D}$ .

Dans le cas d'une distribution aléatoire de particules, nous avons été surpris de constater que, malgré les hypothèses et simplifications du modèle de BKS, l'équation 4.19 fournit une très bonne estimation du durcissement obtenu en DD.

Dans le cas des alliages Zr – 1% Nb, l'équation 4.19 a été vérifiée pour deux familles de précipités de Nb [6], complètement différentes du point de vue des caractéristiques géométriques (taille et espacement). Cette équation a également été vérifiée dans le cas des carbures présents dans l'acier des cuves [10]. D'autres travaux de la littérature [132,136] ont confirmé la validité de cette équation.

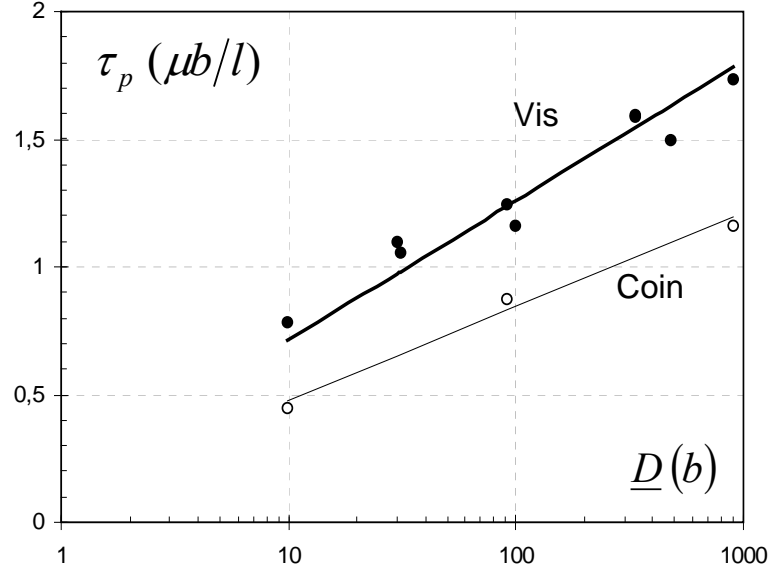


Fig. 26: comparaison entre les résultats DD (cercles) et la prédiction de l'équation 4.17.

En revanche, le modèle de BKS ne fournit aucune indication sur l'extension du modèle aux cas des particules de différentes tailles.

#### 4.6. Durcissement d'Orowan dans le régime thermique

Dans la section précédente, nous avons supposé que la friction du réseau et d'alliage est uniforme sur les dislocations indépendamment de leurs caractères. C'est précisément le cadre théorique habituel des études sur le mécanisme d'Orowan.

Lorsque la friction est plus élevée sur l'un des caractères, toutes les conclusions de la section précédente doivent être remises en cause. Le cas le plus emblématique est bien sûr celui de la structure CC à basse température, où la dislocation vis subit une friction du réseau beaucoup plus forte que celle concernant les autres caractères. Comme mentionné auparavant, la vitesse de la dislocation vis est donnée par l'équation 4.2 ; la vitesse de la dislocation coin est proportionnelle à celle de la dislocation vis avec un facteur de proportionnalité  $K \gg 1$  :

$$v = 2 K v_o \exp\left(-\frac{\Delta G_o}{kT}\right) \sinh\left(\frac{\Delta G_o}{kT} \sqrt{\frac{\tau}{\tau_o}}\right), \quad (4.21)$$

où  $v_o$  est une constante proche de  $10^5$  m/s. Les valeurs adoptées de  $K$  sont les suivantes:

$T$ (K)	50	100	150	200	250
$K$	$10^6$	$10^4$	$10^3$	100	20

Tableau 4: valeurs de la constante  $K$  prises dans les simulations DD.

Nous désignons par  $\tau_p$  le durcissement d'Orowan, qui, dans notre cas, correspond à  $\tau_c - \tau_{ini}$ , où  $\tau_c$  est le maximum de la contrainte atteint pendant le franchissement et  $\tau_{ini}$  la contrainte stationnaire en l'absence d'obstacle.

Contrairement à l'écoulement visqueux à haute température, où la contrainte effective reste très faible, ici la contrainte d'écoulement varie fortement afin de "forcer" les dislocations à se déplacer à la vitesse moyenne nécessaire pour accommoder la vitesse de déformation imposée. Dans toutes nos simulations, la vitesse moyenne des dislocations a été fixée à 1  $\mu\text{m/s}$

L'exemple du mécanisme d'Orowan présenté ici est le cas de précipités de taille 100 nm, cas similaire à celui des carbures présents dans l'acier des cuves. Nous avons réalisé en DD des simulations d'interaction des dislocations vis et coin avec la rangée périodique afin de révéler l'effet de la friction. Ensuite, nous avons étendu notre analyse à la distribution aléatoire.

#### 4.6.1. Réaction entre une dislocation coin et une rangée périodique

A priori, nous pouvions nous attendre à ce que la réaction de cette dislocation soit conforme à celle du régime athermique. Mais, durant l'interaction, un dipôle vis doit se former, ce qui peut induire un écart à l'équation 4.17. Nous avons vérifié par simulations DD cet aspect. La Fig. 27(a) montre la forme critique de la dislocation coin pour deux températures et espacements différents. Comme nous pouvons le constater, il n'y a pas de différence significative en fonction de la température. La dislocation se désancre lorsqu'un dipôle vis est formé.

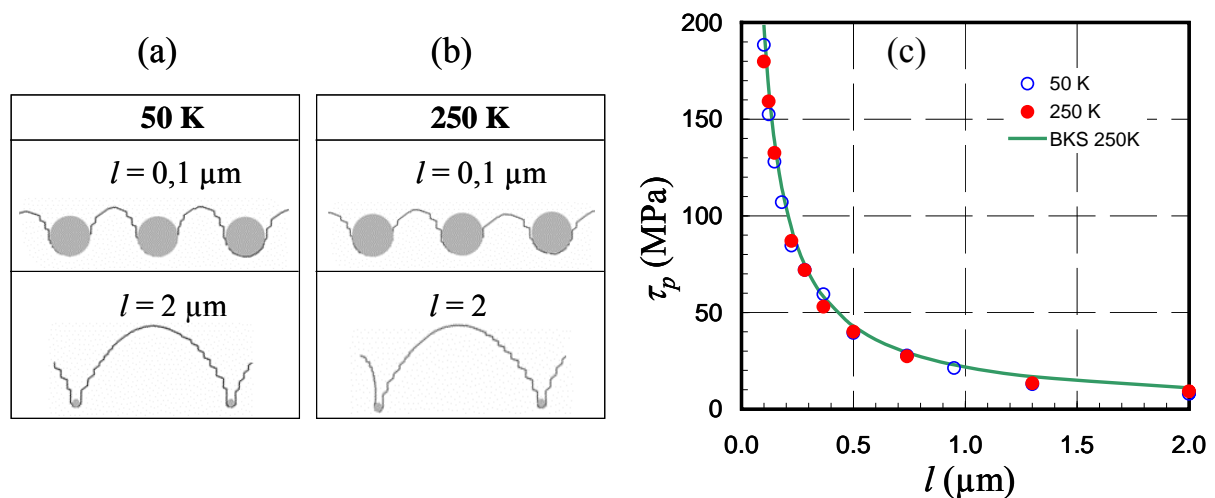


Fig. 27: (a) et (b) configurations critiques de la dislocation coin pour deux différents espacements à différentes températures et (c) l'évolution du durcissement en fonction de l'espacement à 50 et 250 K, comparée à la prédiction du modèle de BKS [108].

L'évolution du durcissement pour la rangée est tracée dans la Fig. 27(c) à 50 et 250 K. La comparaison avec la prédiction du modèle de BKS s'avère très concordante. La mobilité du dipôle vis ne joue aucun rôle. La raison en apparaîtra clairement dans la suite de la discussion.



#### 4.6.2. Réaction entre une dislocation vis et une rangée périodique

Contrairement à la dislocation coin, la forme de la dislocation vis enregistrée à la contrainte critique dépend fortement de l'espacement des particules (voir Fig. 28-a et b). En outre, comme montré sur la Fig. 28(c), le durcissement dépend fortement de la température, qui est différent de la prédiction du modèle BKS [108].

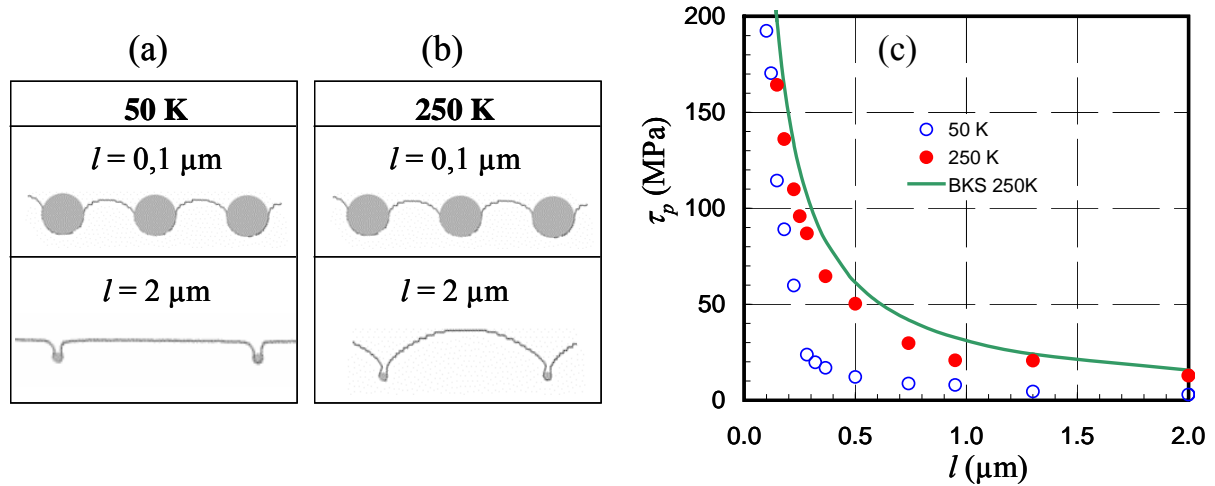


Fig. 28: (a) et (b) configurations critiques de la dislocation vis pour deux différents espacements à différentes températures et (c) l'évolution du durcissement en fonction de l'espacement à 50 et 250 K, comparée à la prédiction du modèle de BKS [108].

Le durcissement à basse température est donc toujours inférieur à celui à haute température. Ce résultat n'était pas attendu. Comment expliquer ces observations ? Dans la section suivante, nous allons voir que l'origine de ce comportement n'est autre que l'écart de mobilité entre la dislocation vis et les autres caractères.

#### 4.6.3. Analyse des résultats

Avant d'analyser les résultats, soulignons un effet important qui agit sur tous les mécanismes dans le domaine thermique ; une conséquence directe de l'écart de mobilité entre dislocations vis et non-vis. La contrainte nécessaire au déplacement de la dislocation vis  $\tau_{vis}$  à une vitesse donnée est plus élevée que celle nécessaire pour faire déplacer une autre dislocation, comme la dislocation coin  $\tau_{coin}$ , à la même vitesse. Étant donné les formes des lois de mobilité considérées à basse température, nous pouvons évaluer [91] cette différence de contrainte due à la mobilité (désignée par  $\Delta\tau_m$  dans la suite) par :

$$\Delta\tau_m = \tau_o \frac{kT}{\Delta G_o} \ln \frac{Kv_o}{Hl} \left[ 2 + \frac{kT}{\Delta G_o} \ln \frac{v^2}{Hlv_o K} \right], \quad (4.22)$$

$\Delta\tau_m$  est perçue comme une "surcontrainte" disponible pour les dislocations non-vis lorsque la contrainte appliquée est égale  $\tau_{vis}$ . La variation de  $\Delta\tau_m$  n'est pas monotone. Nous avons tracé cette évolution en fonction de la température pour les valeurs typiques de différents paramètres (voir Fig. 29). A chaque température, la valeur de  $\Delta\tau_m$  dépend fortement du

rapport de vitesse  $K$ . Alors que  $\Delta\tau_s$  a tendance à baisser avec la température pour s'annuler à  $T = 300\text{K}$ , elle augmente avec la température pour les températures inférieures à  $100\text{K}$ .

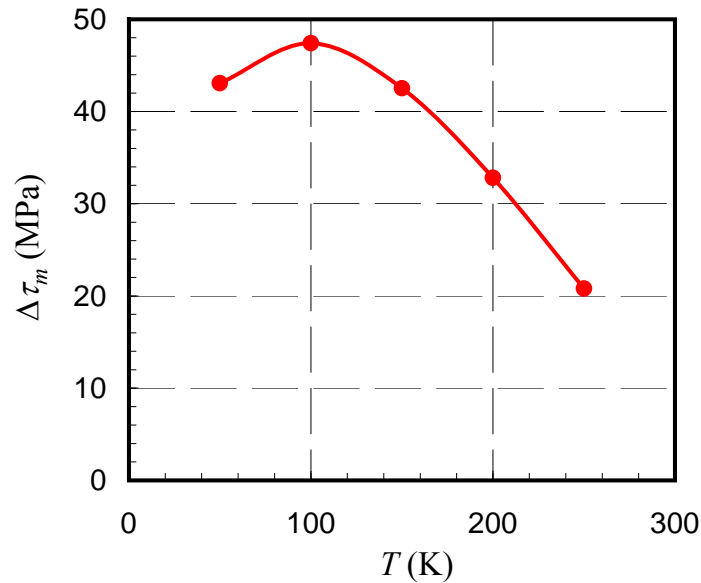


Fig. 29: évolution de la différence de contrainte effective (surcontrainte) sur les dislocations vis et non-vis se déplaçant à la même vitesse.

Ce comportement est tout à fait attendu en raison de la nature des lois de mobilité des dislocations vis et non-vis.

Les résultats obtenus sur la dislocation coin sont relativement simples à interpréter. Si la dislocation se déplace librement à  $\tau_{coin}$  et qu'elle rencontre la rangée de particules, la contrainte doit croître afin de lui permettre de se courber entre les particules. La courbure nécessite le même travail contre la tension de ligne. En revanche, pour encercler l'obstacle, nous pouvons suspecter la mobilité des segments vis de retarder la formation de la boucle. En effet, l'attraction dipolaire, de l'ordre de  $\mu b/(2\pi D) \approx 30\text{ MPa}$ , aide les segments vis à se déplacer. A cette attraction, on peut ajouter le durcissement  $\tau_p$ . La somme de ces deux composantes  $\mu b/(2\pi D) + \tau_p$  est supérieure à l'incrément de contrainte manquant pour permettre le mouvement des segments vis, c'est-à-dire  $\Delta\tau$ . Ainsi, la faible mobilité des segments vis est compensée par le durcissement et l'attraction dipolaire. C'est pourquoi le durcissement prédit par la DD est conforme à la théorie de BKS.

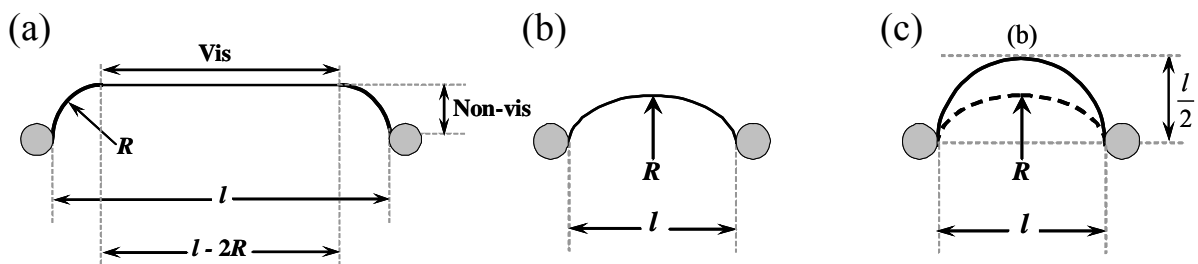


Fig. 30: (a) forme critique de la dislocation vis à grand  $l$ ; (b) forme intermédiaire à faible  $l$ ; (c) forme critique à faible  $l$ .

Le cas de la dislocation vis est plus complexe. En effet, nous observons sur la Fig. 28 une forte sensibilité de  $\tau_p$  à  $l$  lorsque ce dernier est faible. En revanche, aux grands espacements, la variation de  $\tau_p$  est très faible. En effet, nous devons distinguer deux régimes en fonction de l'espacement (voir Fig. 30).

A grand  $l$ , un segment rectiligne de caractère vis subsiste, alors qu'à faible espacement, nous ne pouvons plus distinguer la présence d'un segment vis (voir Fig. 30-c). Ceci a une conséquence importante sur le durcissement.

- **Régime des grands espacements entre les particules**

La loi de mobilité de la dislocation vis implique une dépendance vis-à-vis de la longueur de cette dislocation. Or, la présence périodique de particules coupe la ligne de la dislocation en successions de segments de taille égale à l'espacement des particules  $l$ . Pour contrebalancer la diminution de la longueur, la contrainte doit donc augmenter. Cette source de durcissement est désignée dans la suite par  $\Delta\tau_l$ .

L'avancement du segment vis conduit inévitablement à la courbure de la dislocation au voisinage de la particule, formant ainsi une section de dislocation non-vis, connectée d'un côté à la section vis et, de l'autre, à la particule. Puisqu'elle dispose d'une surcontrainte (voir discussion ci-dessus), une courbure de rayon  $R_m$  est possible sans que cela nécessite une augmentation de contrainte autre que  $\Delta\tau_l$ . Il est important de noter qu'étant donné la force motrice de la courbure  $\Delta\tau_m$ , ce rayon de courbure  $R_m$  est approximativement égal à  $\mu b/\Delta\tau_m$ . Pour quantifier  $\Delta\tau_l$ , rappelons que longueur du segment vis diminue de  $l_o$  (longueur initiale) à  $(l - 2R)$  ce qui nous donne un durcissement égal à :

$$\Delta\tau_l = \tau_o \frac{kT}{\Delta G_o} \ln \frac{l_o}{l - 2R_m} \left[ 2 + \frac{kT}{\Delta G_o} \ln \frac{\nu^2}{l_o (l - 2R_m) H^2} \right], \quad (4.23)$$

Comme le terme entre parenthèses ne varie pas beaucoup,  $\Delta\tau_l$  peut être considéré proportionnel à  $\ln l$ . Cette composante de durcissement varie lentement avec  $l$ , ce qui explique le faible durcissement aux grands espacements dans la Fig. 28. Dans la suite, nous appelons cette source de durcissement *effet longueur*.

- **Régime des petits espacements entre les particules**

Il est facile de constater que lorsque  $l < 2R$ , une autre source de durcissement doit exister en plus de l'effet longueur. En effet, la courbure de la dislocation vis de part et d'autre des particules réduit sa longueur jusqu'à un état intermédiaire (Fig. 30-b), où la section vis disparaît complètement. La contrainte doit augmenter pour vaincre la tension de ligne de la dislocation entièrement courbée afin d'atteindre la courbure critique d'Orowan, c'est-à-dire avec un rayon de courbure de  $l/2$ .

Nous appelons cette source de durcissement *effet tension de ligne*  $\Delta\tau_{il}$ . Afin d'évaluer ce durcissement, nous posons deux postulats/conditions permettant de borner ce durcissement : (i)  $\Delta\tau_{il}$  doit correspondre à celui prévu par BKS  $\Delta\tau_{BKS}$  (équation 4.17) si la courbure initiale était nulle ; (ii) lorsque  $l = 2R_m$ ,  $\Delta\tau_{il}$  doit être nulle, puisque la courbure de l'état intermédiaire correspond à la courbure critique. Par conséquent, lorsque  $l < 2R_m$ , la courbure intermédiaire de rayon  $R_m$ , doit être soustraite de la courbure critique dans la formulation de  $\Delta\tau_{BKS}$ .  $\Delta\tau_{il}$  doit correspondre à l'effort nécessaire à la diminution du rayon de courbure de  $R_m$  à  $l/2$  :

$$\Delta\tau_{il} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left( \frac{1}{l} - \frac{\Delta\tau_m}{\mu b} \right) \ln \left( \frac{2D}{b} \right) \quad (4.24)$$

Il est important de noter que ce durcissement est proportionnel à l'inverse de l'espacement des particules. Ceci explique la forte sensibilité de  $\tau_p$  à  $l$  observée à faibles espacements dans la Fig. 30(c).

### Comparaison avec les résultats des simulations

Pour résumer, lorsque  $l \geq 2R$ , seul l'effet longueur intervient comme source de durcissement. Le mécanisme d'Orowan se traduit par  $\tau_p = \Delta\tau$ . Mais, pour  $l < 2R$ , nous devons ajouter la résistance de la tension de ligne, avec un durcissement total de  $\tau_p = \Delta\tau_l + \Delta\tau_{il}$ .

Afin de valider ce modèle, nous montrons dans la Fig. 31 la prédiction du modèle en comparaison avec les résultats DD. Dans les deux températures (50 et 250 K) notre modèle – sans variable ajustée – décrit correctement le durcissement de la rangée périodique. Au même espacement, le durcissement augmente avec la température pour s'approcher du durcissement athermique [10]. La présence de la frontière  $l = 2R_m$  est bien marquée, à basse température, par la nette accélération du durcissement à faibles espacements.

Dans le cas particulier où  $l = 2R$ , la section vis disparaît en même temps que se produit le désancrage. Dans ce cas et dans les autres cas où  $l < 2R$ , l'évaluation de  $\Delta\tau$  pose un problème lorsque  $l - 2R$  tend vers zéro dans l'équation 4.23. Il convient alors de prendre un rayon de coupure  $l_{min}$  dans l'équation. Ce rayon n'est pas "complètement" un artefact des simulations DD. Afin de distinguer le caractère vis d'un segment de dislocation, celui-ci doit avoir une taille physique minimale dans la direction du vecteur de Burgers.

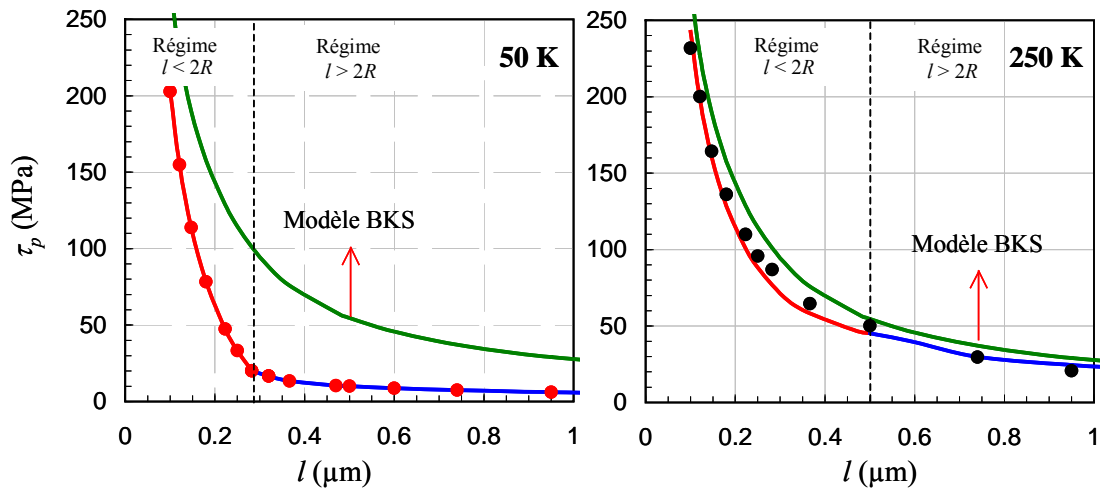


Fig. 31: comparaison entre les résultats des simulations DD (cercles) et la prédiction du modèle exposé dans le texte (lignes continues bleue et rouge). La prédiction du modèle de BKS est ajoutée pour comparaison.

Lorsque la dislocation est très courbée, il est impossible de distinguer la structure de cœur particulière de la dislocation vis (voir la discussion faite dans la thèse de Naamane [91]).

Afin de résumer les résultats obtenus dans les régimes de petits et grands espacements, nous proposons le schéma montré dans la

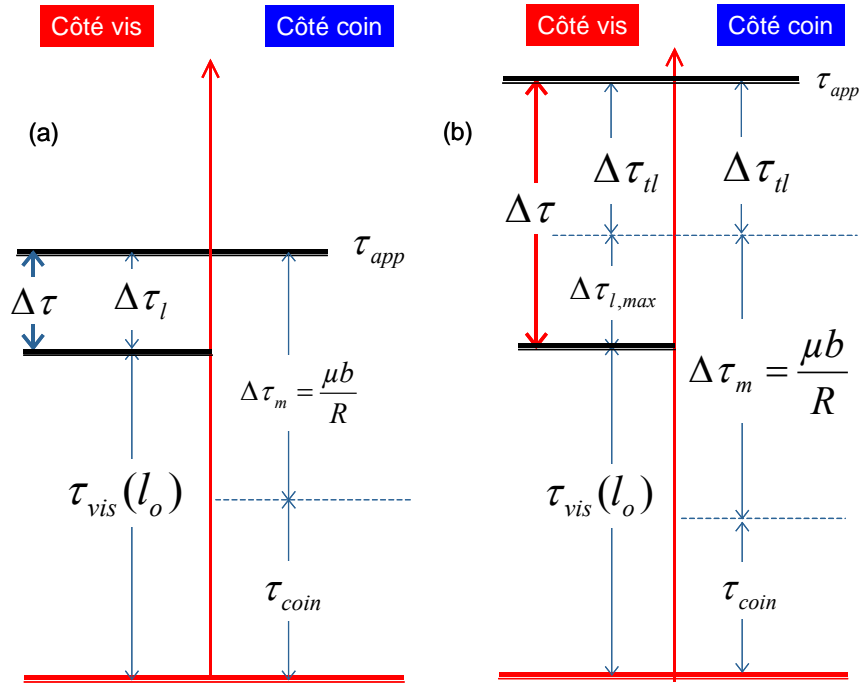


Fig. 32 : schéma montrant les différentes composantes de la contrainte appliquée, vues par les segments vis et non-vis à grand (a) et petit (b) espacements.

Notons que  $\Delta\tau_{l,max}$  représente le plafond de l'effet de longueur, c'est-à-dire du durcissement induit par la diminution de la longueur du segment vis. Ce plafond est atteint lorsque l'espacement entre les précipités est égal ou inférieur au double du rayon de courbure des segments non-vis  $R$ . Par ailleurs, la composante  $\Delta\tau_l$  est la même sur les deux types des segments en raison de la courbure totale de la dislocation. Dans cette condition, il devient difficile de distinguer les différents caractères de la dislocation.

#### 4.6.4. Durcissement dû à une distribution aléatoire

Bien évidemment, la distribution en rangées périodiques est loin de représenter une microstructure réaliste. Afin d'étudier l'influence d'une distribution aléatoire sur le durcissement, nous avons effectué des simulations DD dans une boîte de  $5 \times 5 \times 3 \mu\text{m}^3$ , contenant une densité de dislocations de  $10^{12} \text{ m}^{-2}$ , formée essentiellement de dislocation vis [91], représentative de la microstructure déformée. Les particules sont d'une taille de 100 nm, avec une densité de  $3 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$ , ce qui revient à un espacement planaire de 0,55  $\mu\text{m}$ . Les simulations montrent que la microstructure sous chargement est bien différente lorsque la température varie (voir Fig. 33).

A basse température, même avec la présence des carbures, la microstructure reste largement marquée par la forte densité des dislocations vis. A 250 K, la microstructure ressemble à celle obtenue dans le régime athermique [10].

Les courbes de chargement associées à ces observations sont tracées dans la Fig. 34(a). Malgré la fluctuation de la contrainte, l'effet durcissant des carbures reste significatif, même s'il diminue lorsque la température baisse. La différence entre les moyennes des contraintes, avec et sans carbures, nous renseigne sur le durcissement à l'échelle mésoscopique des carbures (voir Fig. 34-b). On peut remarquer une nette diminution du durcissement lorsque la

température décroît. Ceci va dans le sens des observations obtenues avec la rangée périodique présentée dans ? la dernière section.

Compte tenu de la prédominance de la population vis, nous avons répété ces simulations en remplaçant la microstructure initiale des dislocations par une dislocation vis périodique infinie. Ensuite, nous avons calculé le durcissement correspondant et nous l'avons comparé au durcissement des simulations massives (voir Fig. 34-b). Les résultats montrent clairement que le durcissement dans les simulations massives est le même que celui obtenu avec la dislocation infinie. Nous avons donc la confirmation que les dislocations vis contrôlent le durcissement d'Orowan à basses températures.

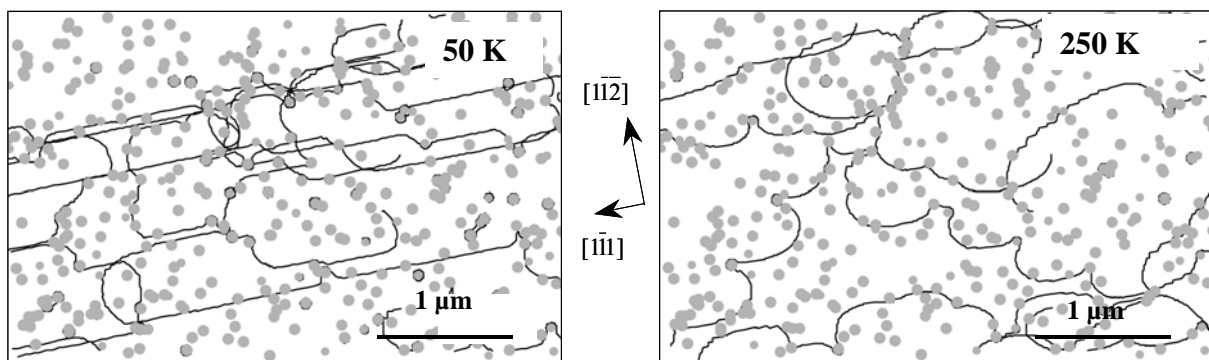


Fig. 33: microstructure de dislocations interagissant avec les carbures à différentes températures.

La question qui se pose maintenant est : comment rendre compte de l'aspect aléatoire de la distribution sur la mobilité de la dislocation vis ? Y-a-t-il un effet de tension de ligne ou s'agit-il seulement de l'effet de longueur ?

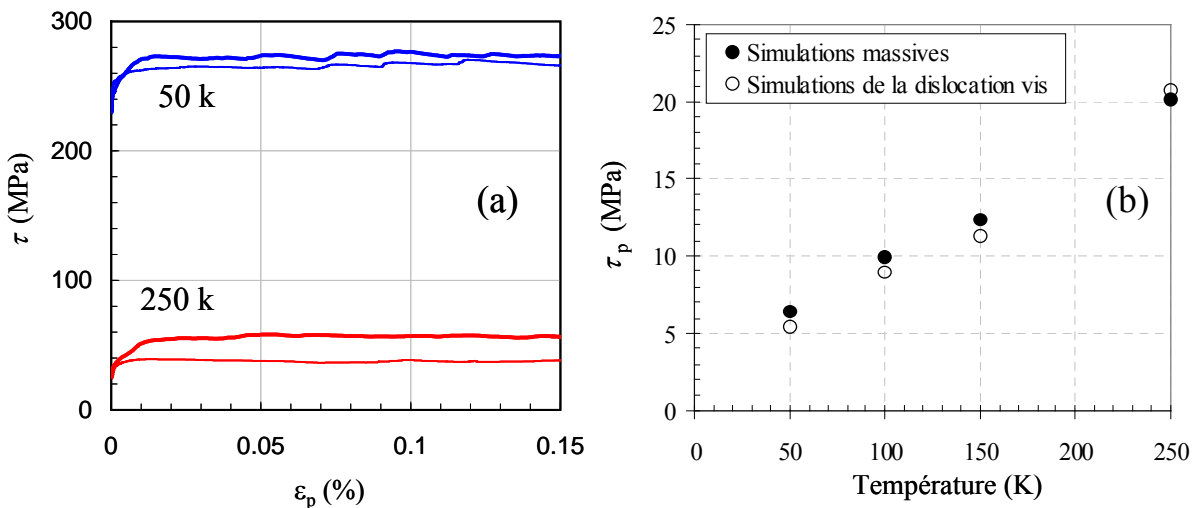


Fig. 34: (a) courbes de chargement à 50 et 250 K avec (ligne en gras) et sans (ligne fine) carbures ; (b) évolution du durcissement d'Orowan en fonction de la température dans les simulations massives et avec une dislocation vis périodique.

Nous avons vu dans la section précédente que le paramètre clef dans le durcissement est l'espacement moyen  $l$  comparé à  $2R_m$ . Intuitivement, nous avons commencé par évaluer

l'espacement moyen *effective*  $l_{eff}$  des carbures sur la dislocation vis infinie. Nous savons que  $l_{eff}$  est plus faible que  $l$  mais cela n'est pas suffisant compte tenu des ordres de grandeur de  $R_m$ . Nous suivons donc le raisonnement suivant.

Nous avons vu que lorsque la dislocation vis se courbe, la composante non-vis acquiert une courbure  $R_m = \mu b / \Delta \tau_m$ . Comme schématisé dans la Fig. 35, l'aire balayée par la particule correspond à  $A = (R + D/2) \times (l_{eff} + D)$ . Or, l'aire par particule peut être reliée directement à la densité surfacique des particules. Pour simplifier les calculs,  $R_m$  est pris égal à 150 nm, ce qui correspond à une moyenne à basse température. L'application numérique donne une valeur de  $l_{eff}$  proche de 1,5  $\mu\text{m}$ , largement supérieure à  $2R_m$ . Par conséquent, nous suspectons le durcissement d'être dû à l'effet de longueur.

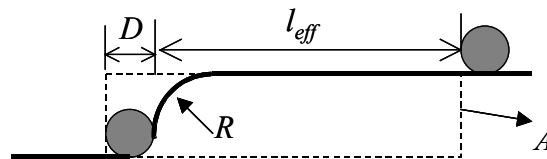


Fig. 35: schéma du calcul de la longueur effective des segments vis.

L'utilisation de l'équation 43 avec la longueur effective donne une estimation du durcissement que nous pouvons comparer aux résultats des simulations massives de la Fig. 36. La concordance qu'on observe avec les résultats obtenus à basse température est excellente. Ce modèle, simple et sans paramètre ajusté, suffit donc à expliquer le durcissement à basse température de cette distribution de carbures.

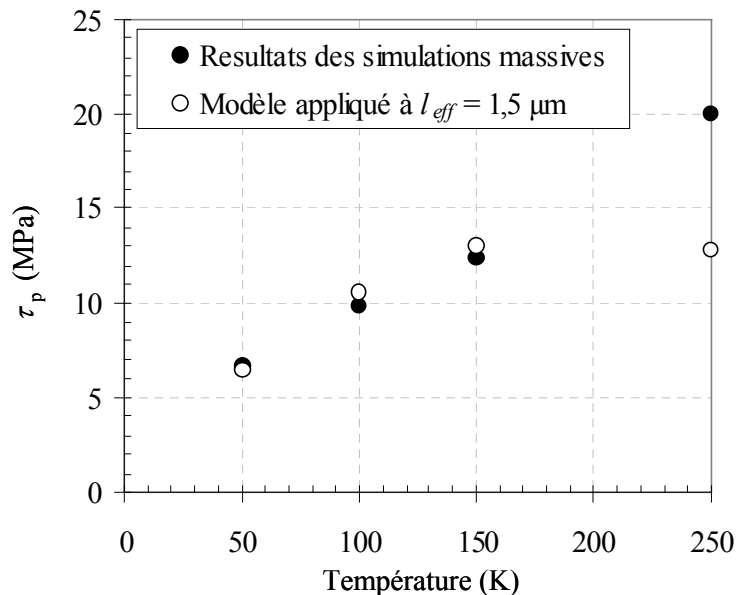


Fig. 36: comparaison entre le durcissement obtenu dans les simulations massives et le durcissement lié à l'effet de longueur.

Nous observons cependant que ce modèle s'écarte significativement des résultats DD à 250 K. Ceci confirme, sans surprise, que notre modèle de dislocation vis droite n'est plus adéquat en régime transitoire, comme nous pouvons le remarquer également sur la Fig. 33.

## 4.7. Durcissement par les cavités

Dans le deuxième chapitre de ce mémoire, nous avons montré qu'il était possible d'interpréter à l'échelle mésoscopique les résultats de la DM sur l'interaction entre la dislocation et la cavité. L'analyse de ces résultats alimente la DD par une grandeur fondamentale :  $\Delta G(\tau)$ , traduisant l'énergie mécanique manquante au franchissement et nécessitant une activation pendant un temps d'incubation.  $\tau$  représente ici la contrainte effective. La question qui se pose maintenant est de savoir comment utiliser ces données dans les simulations mésoscopiques de type DD ?

A l'échelle continue, il est difficile de rendre compte de l'existence d'une cavité et de sa surface. Le seul travail publié, à notre connaissance, est celui de Scattergood et al. [109] dans lequel la cavité est représentée par une surface sphérique exerçant une force sur le segment débouchant sur cette surface. Cette force ponctuelle de surface a été déduite de l'énergie nécessaire à la création d'une marche de hauteur  $b$  sur la surface. Avec cette approche, il n'est pas possible de rendre compte de l'activation thermique. Au début des années 1980, cette forte approximation était incontournable pour simuler la résistance au cisaillement de la surface. En revanche, grâce aux résultats de la DM discutés dans le deuxième chapitre de ce mémoire, il n'est plus besoin de telles approximations. La démarche multi-échelle peut nous fournir les données dont nous avons besoin à l'échelle de la DD.

Nous avons démontré par ailleurs que la notion de contrainte effective joue le rôle de force motrice mécanique pour le franchissement. Cette contrainte est facilement calculée en DD. Afin de simuler l'activation thermique, il suffit d'attribuer à une sphère dans l'espace de simulation représentant la cavité, une résistance au passage de la dislocation, correspondant à la contrainte critique à 0 K, calculée en DM.

Lorsque la contrainte effective est inférieure à la contrainte critique, nous calculons une probabilité de franchissement et nous la comparons à un tirage aléatoire. Concrètement, lorsqu'un segment se retrouve à l'intérieur de cette sphère, nous évaluons sa contrainte effective et nous calculons l'énergie d'activation correspondante (voir Fig. 18). Utilisant l'équation 3.7, nous pouvons évaluer la probabilité d'activation  $\Delta P$  pendant l'intervalle de temps  $\Delta t$  correspondant à une itération :  $\Delta P = \omega(\tau) \Delta t$ , ce qui nous donne :

$$\Delta P = v_D \frac{b}{w} \exp\left(-\frac{\Delta G(\tau)}{kT}\right) \Delta t, \quad (4.25)$$

où  $w$  est la taille de la cavité. Si le résultat d'un tirage aléatoire vaut  $x$ , le franchissement est alors autorisé lorsque  $x$  est inférieur à  $\Delta P$ . La probabilité de survie  $P_o$ , résultante sur un intervalle de temps  $\theta$ , suit la distribution binomiale [137] :

$$P_o = (1 - \omega(\tau)\Delta t)^{\frac{\theta}{\Delta t}}. \quad (4.26)$$

Nous pouvons facilement vérifier que l'équation 4.26 conduit à la probabilité de survie de la distribution de Poisson (donnée dans l'équation 3.10) lorsque  $\Delta t$  tend vers zéro.

Notre procédure de discrétisation temporelle conserve donc les propriétés stochastiques de l'activation thermique.



### 4.7.1. Validation de la démarche multi-échelle

Avant de procéder à une étude extensive du durcissement provoqué par les cavités, il faut bien évidemment valider la démarche et la méthode numérique employées dans la DD.

Pour cela, nous avons réalisé des simulations DD dont les conditions sont identiques à celles utilisées dans les simulations DM [65]. Ceci inclut les dimensions de la boîte, la construction d'une dislocation infinie, la température, la vitesse de déformation, la taille des cavités, etc.

D'abord, sans l'activation thermique, la contrainte critique doit être indépendante de l'incrément de temps dans les simulations DD, ce qui a été vérifié. Comme montré dans la Fig. 37, les contraintes critiques appliquées obtenues sont 240 MPa en DM et 245 MPa en DD. L'écart relatif ne dépassant pas 3 %, nous pouvons considérer que notre démarche est tout à fait valable à 0 K.

Néanmoins, nous devons ici signaler que la contrainte critique fluctue légèrement dans les simulations DD lors des différents passages de la dislocation. En l'absence d'activation numérique, cette fluctuation est d'origine purement numérique, liée à la topologie discrète des segments. Elle traduit le changement de configuration des segments, piégés à l'intérieur de la cavité, d'une interaction à l'autre. Cette variation, si elle était de large amplitude, remettrait en cause la totalité du processus de traitement de l'interaction avec les cavités en DD. Heureusement, nous avons vérifié que la contrainte critique varie dans une fourchette de 5% autour d'une contrainte moyenne, très proche de celle obtenue en DM.

Un autre aspect important doit être souligné. En plus de la contrainte critique, la forme de la dislocation doit être relativement bien reproduite en DD. Dans le cas inverse, si la surface balayée en DD est très différente de celle obtenue en DM, la DD risque de ne pas prédire correctement le durcissement d'une distribution aléatoire des cavités, puisque les statistiques d'interaction seront altérées. Mais, comme nous pouvons le constater sur la Fig. 37, les deux surfaces sont très proches l'une de l'autre.

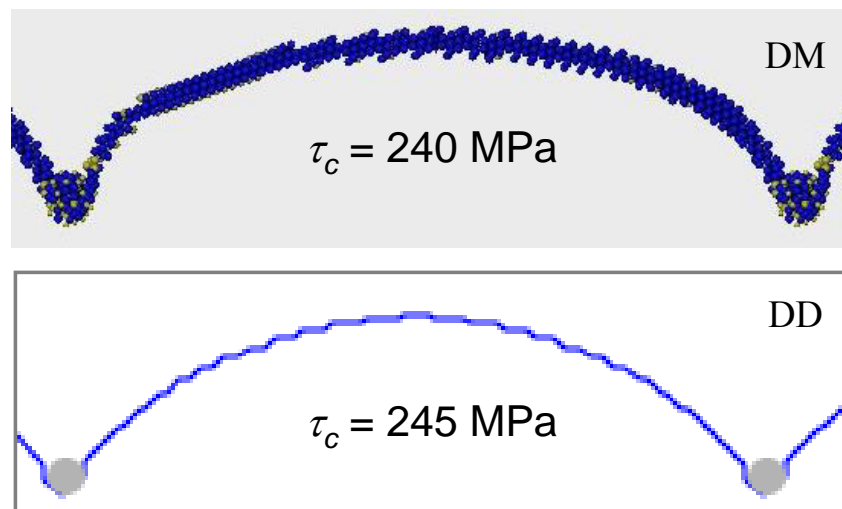


Fig. 37: configuration critique de la dislocation coin à 0 K obtenue en dynamique moléculaire et en dynamique des dislocations.

En observant la Fig. 37, il apparaît important de s'interroger sur l'écart entre la forme de la dislocation dans les deux types de simulations. A priori, puisque nous avons considéré les modules élastiques ( $\mu$  et  $\nu$ ) permettant de reproduire exactement l'écart d'énergie entre la dislocation vis et coin donné par les simulations DM, nous devrions avoir la même forme de la dislocation. Or, ceci n'est exact pour deux raisons.

Premièrement, à plusieurs reprises, les simulations DM ont montré une faible mobilité de la dislocation mixte à  $19,5^\circ$  de la direction coin, c'est-à-dire la dislocation mixte parallèle à la 2<sup>ème</sup> direction dense  $\langle 111 \rangle$  du plan de glissement, la première direction dense étant le vecteur de Burgers. Surtout avec les potentiels récents du fer [32,33], la contrainte de Peierls pour cette dislocation mixte se révèle beaucoup plus élevée que celle de la dislocation coin [38,138]. Des cas similaires ont été rapportés dans d'autres structures, comme dans la structure CFC [139] et la structure diamant [25]. Or, cette différence de mobilité n'a pas été prise en compte dans nos simulations DD en raison de l'absence de donnée concernant cette dislocation.

Deuxièmement, dans nos calculs DD, la cavité est assimilée à une sphère à l'intérieur de laquelle nous associons une probabilité d'activation binomiale. Nous ne prenons pas en compte, par exemple, la relaxation de la surface de la cavité et la modification du cœur de la dislocation en contact avec la surface. Même si les deux formes ne sont pas identiques, nous considérons que le but visé dans la démarche multi-échelle est quand même atteint, pour les deux raisons présentées ci-dessus : la contrainte critique et la surface balayée sont très proches en DM et en DD.

#### 4.7.2. Effet de la température

Nous avons réalisé des simulations DD à différentes températures sur l'interaction entre une dislocation coin et une rangée de cavités de 1 nm de diamètre, espacées de 20 nm. La comparaison avec les résultats de la DM [65] en termes de contraintes critiques appliquées est effectuée dans la Fig. 38. Nous constatons aisément que la concordance est très bonne, même si les contraintes prédites par la DD restent souvent légèrement inférieures à celles de la DM.

Comme nous l'avons déjà signalé, la fluctuation de la contrainte dans la DD n'est pas seulement d'origine stochastique, liée au caractère probabiliste du désancrage, mais elle est également une conséquence de la modification de la configuration critique des segments à l'intérieur de la cavité. Ce facteur peut induire une fluctuation significatives comme on peut le constater sur la Fig. 38. Il s'agit donc d'un des problèmes à résoudre dans le futur, afin d'optimiser et de rationalise la réponse du code de dynamique des dislocations.

En dépit de cette indétermination et compte tenu de l'aspect statistique de l'interaction avec une population de cavités, c'est-à-dire distribuée aléatoirement, nous estimons qu'il est peu probable que cette fluctuation puisse entraîner une erreur importante dans l'évaluation du durcissement.

Pour résumer, grâce à notre démarche multi-échelle mise en place dans cette étude, la DD permet de reproduire les résultats de la DM, au moins dans le domaine des températures exploré par la DM.

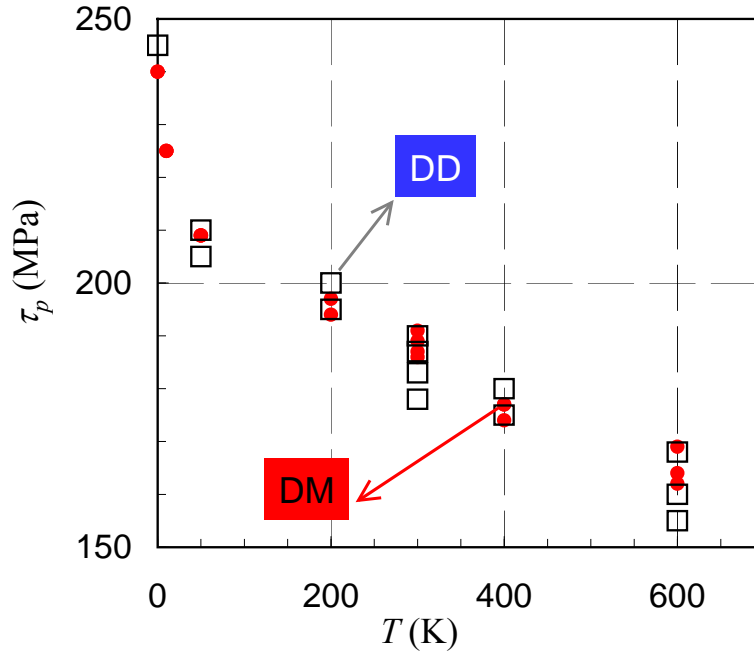


Fig. 38: durcissements sur une dislocation coin provoqués par une rangée de cavités de 1 nm, espacées de 20 nm. Les carrés désignent les résultats de la DD et les cercles pleins ceux de la DM.

### 4.7.3. Durcissement d'une distribution aléatoire de cavités

Dans la section précédente, nous avons vu que la prise en compte de l'activation thermique à l'échelle continue est tout à fait possible grâce à la méthode de transition proposée dans ce mémoire. Nous avons également démontré que la DD était en mesure de reproduire *quantitativement* les résultats de la DM à différentes températures pour différentes tailles de cavités [10].

Notre démarche multi-échelle ainsi confirmée, nous pouvons maintenant nous atteler à la véritable *mission* de la DD : prédire le durcissement associé à une microstructure réaliste de cavités. Cet objectif peut être atteint lorsque la cellule de simulations DD contient une population de cavités représentative d'une véritable distribution en termes de nombre et de distribution. La contrainte d'écoulement *mésoscopique* doit refléter la statistique de plusieurs centaines d'interactions avec les dislocations [6].

Prenons l'exemple de la distribution de cavités discuté dans la thèse de Queyreau [10]. Nous avons choisi le volume de notre cellule de telle sorte qu'elle puisse contenir près de 12 000 cavités. Quant à la microstructure initiale des dislocations, la dislocation infinie (périodique) semble fournir les conditions aux limites les plus "neutres" vis-à-vis de la contrainte d'activation. En effet, une dislocation ancrée, comme la source de Frank-Read, nécessiterait un seuil donné d'activation, même en l'absence d'obstacle. Or, un tel seuil serait difficile à déconvoluer de la résistance des cavités.

Un autre aspect important des simulations DD est la vitesse de déformation imposée. En fonction de cette vitesse, la contrainte sera ajustée afin d'imposer une vitesse moyenne de la dislocation. Afin de simuler une déformation réaliste, nous avons choisi une vitesse de

déformation impliquant une vitesse moyenne de la dislocation de 5 m/s. La Fig. 2 montre les courbes de déformation pour deux températures : 0 et 600 K.

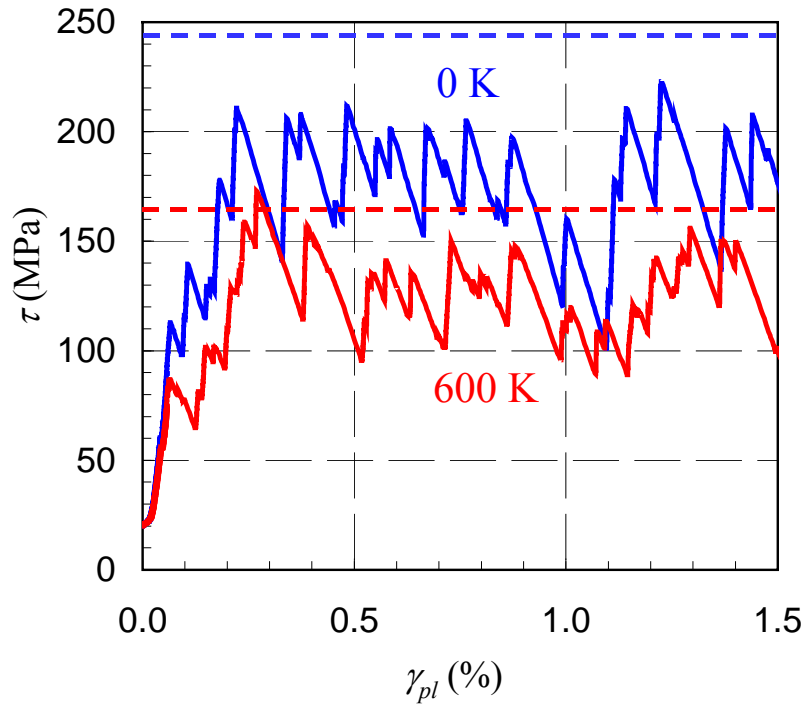


Fig. 39 : cisaillement en fonction du cisaillement plastique pour une dislocation infinie interagissant avec une distribution aléatoire de cavités à 0 et 600 K. Les droites pointillées indiquent le niveau du durcissement de la rangée périodique avec le même espacement.

En pointillé dans cette figure, nous indiquons pour les deux températures le niveau de durcissement correspondant à la rangée périodique, dont l'espacement est égal à l'espacement moyen de la distribution aléatoire. D'une part, comme prévu, l'activation thermique à 600 K abaisse sensiblement la contrainte d'écoulement (près de 25%) et, d'autre part, à chaque température, le durcissement résultant de la distribution aléatoire est significativement inférieur à celui de la rangée.



## 5. Discussion et conclusions

Les différents thèmes abordés constituent les briques indispensables à la construction des simulations multi-échelles du comportement mécanique des aciers des cuves. Beaucoup de briques manquent encore, surtout celles traduisant la microstructure complexe de ces matériaux.

Nous allons maintenant discuter cet aspect multi-échelle en invoquant les trois mécanismes de plasticité discutés dans ce mémoire : la friction du réseau, l'interaction avec les cavités et les obstacles d'Orowan.

### 5.1. Friction du réseau dans le fer

Nous avons vu dans le deuxième chapitre comment la DM a permis de reproduire et de caractériser le mécanisme du double-décrochement, responsable du mouvement des dislocations à basse température. Quel a été l'apport de la démarche multi-échelle sur ce point ? Nous pouvons situer l'originalité de cette démarche à plusieurs niveaux.

Premièrement, les simulations *ab initio* ont permis de valider, pour la première fois, la structure de cœur de la dislocation vis prédite par les récents potentiels empiriques [32,33]. Ceci a remis en question une grande quantité de spéculations théoriques inspirées de la structure à trois plis, comme le glissement turbulent non conservateur et non planaire de la dislocation vis [30] ou les double-décrochements polarisés [31]. Ces résultats ne révèlent donc pas un comportement anormal de la nature, mais, tout simplement, les prévisions erronées des anciens potentiels.

Deuxièmement, la méthode de transition proposée dans ce mémoire conduit à l'identification directe, à partir des simulations DM, des paramètres d'activation  $\tau_c(T)$  et  $\Delta G(T)$ . Le seul paramètre nécessaire à cette identification est une valeur *approximative* du volume d'activation, impliquant une connaissance minimale du processus en question. Les simulations à vitesse de déformation constante rendent possible la comparaison avec les essais de traction sur les monocristaux, toujours réalisés à vitesse de déformation constante. Nous avons montré que l'écart entre les conditions de simulation (terme logarithmique de l'équation 3.21) et les conditions des essais mécaniques peut très bien expliquer l'écart entre les contraintes critiques en simulation et en expérience. Nous pouvons donc faire confiance aux valeurs trouvées pour l'énergie d'activation en fonction de la contrainte effective.

Troisièmement, nous retrouvons toute la puissance et l'originalité de la démarche multi-échelle dans la "suffisance" des simulations elles-mêmes. La mise en place de la méthode de transition permet de contourner les modèles théoriques du double-décrochement, tous fondés sur des concepts mésoscopiques comme la tension de ligne ou la masse de la dislocation. Compte tenu des dimensions atomiques du double-décrochement, nous pouvons nous interroger, par exemple, sur la validité de l'approximation de la tension de ligne de De Witt [55] dans la description de la courbure d'un décrochement, ou sur la notion de flexibilité de la ligne de la dislocation entre deux rangées atomiques. Prenons l'exemple de l'approximation de la corde élastique d'une dislocation allongée dans la direction  $x$ , pouvant se déplacer dans la direction  $y$  :

$$T_l \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + K(y) + b\tau = \gamma \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}, \quad (4.27)$$

où  $T_l$  est la tension de ligne de De Wit,  $K(y)$  est le potentiel de Peierls et  $\gamma$  la masse de la dislocation. Cette équation a été fréquemment utilisée dans les années 1960 [83,88] et même récemment [140] pour déterminer la configuration de l'état de col et les modes propres de vibrations dans cet état. Nous constatons tout de suite l'impasse dans lequel l'équation 4.27 nous mène :

- (i) pour calculer les modes propres, il faut connaître le potentiel de Peierls. Or, précisément, le potentiel de Peierls est l'inconnue principale du processus ;
- (ii) un autre problème sérieux résulte du fait que, même si le potentiel de Peierls est connu, l'équation 4.27 stipule que le potentiel en question ne dépend pas du caractère de la dislocation, c'est-à-dire que  $K(y)$  est fonction de  $y$  seulement. Or, nous savons qu'il est illusoire de parler de potentiel de Peierls sans préciser le caractère de la dislocation.  $K(y)$  doit donc être, également, une fonction de  $\partial y / \partial x$ . Mais, dans ce cas, l'équation 4.27 devient très difficile à résoudre.

Par ailleurs, le calcul des modes propres dans la configuration de col fait resurgir la principale critique de la théorie de transition : peut-on considérer l'état de col comme un véritable état d'équilibre statistique, où les modes propres ainsi calculés ont le temps de "s'exprimer" ? N'oublions pas que cet état n'est autre qu'un état *instable* du système.

Citons à ce propos une démarche originale et difficile à mettre en œuvre, élaborée par Pizzagali et al. [89]. Elle consiste à déterminer la forme exacte de la dislocation à l'état de col, dont la configuration a été prédite par la *Nudged Elastic Band* (NEB). L'idée est de suivre le déplacement du centre du *misfit* par rangée atomique afin de déterminer la position locale du centre de la ligne. On peut regretter que les auteurs n'aient pas discuté davantage la forme critique de la ligne en fonction de la contrainte. Cela aurait permis de statuer sur la validité de l'approximation de la corde. Cependant, même avec la détermination de la forme critique, reste encore le problème théorique de la détermination du volume d'activation ou, d'une façon plus générale, le travail appliqué.

La coordonnée de la réaction permettant d'évaluer le travail de la contrainte appliquée reste peu adéquate dans le cas d'activations en deux dimensions. En effet, les approches quasi-statiques de type NEB ne prennent pas en compte la masse inertielle de la dislocation : lorsque la dislocation saute sur une longueur  $l$  d'une amplitude  $e$ , cela ne nous renseigne en rien sur le volume d'activation. L'approche classique assimilant ce volume avec la grandeur  $(e b l)$  n'est en réalité qu'une approximation. Le travail de la contrainte appliquée est à relier à la perturbation des positions atomiques due au saut de la dislocation. Compte tenu de la grande vitesse à laquelle la dislocation se positionne en état de col, les positions atomiques éloignées de la dislocation ne se modifient pas instantanément, la vitesse de propagation de "l'information" étant limitée à la vitesse du son. Le calcul du volume de l'activation doit donc faire intervenir la vitesse de propagation de l'onde élastique créée par le saut.

En raison de ces difficultés, il est appréciable que la démarche multi-échelle ne nécessite pas l'utilisation de modèles théoriques fondés sur la théorie élastique des dislocations.

## 5.2. Interaction avec les cavités

L'exemple de l'interaction entre la dislocation coin et les cavités dans le fer, discuté dans ce mémoire, représente la première démarche entièrement multi-échelle jamais mise en œuvre, du moins à notre connaissance. Le durcissement provoqué par une distribution réaliste de cavités a été exclusivement déterminé grâce aux simulations, de l'échelle atomique jusqu'à l'échelle continue. Ce durcissement est la donnée la plus importante utilisée dans les modèles d'homogénéisation ou dans les simulations d'éléments-finis. Bien sûr, la validité des résultats est cautionnée par la précision des données microstructurales, à savoir : l'histogramme des tailles des cavités et leurs distributions. Ces dernières sont obtenues à partir d'un autre type de simulations multi-échelles, cette fois entièrement dédiées à la prédiction de l'évolution de la microstructure sous irradiation. Ces simulations sont de nature physico-chimique (diffusion, thermodynamique des phases, etc.) et indépendantes de la réponse mécanique associée. Malheureusement, parce que cette chimie est complexe et que les différents processus influençant l'évolution de la microstructure sont couplés, ces simulations multi-échelles sont moins abouties que les celles portant sur le comportement mécanique.

N'oublions pas que les informations et les données obtenues sont valables pour un type d'interaction "coin", c'est-à-dire formant une marche de la surface de la cavité. L'interaction avec les dislocations vis n'a pas encore été caractérisée en DM. Il est probable, au moins à basse température, que le résultat de l'interaction puisse varier en fonction du caractère de la dislocation. Ainsi, la formation d'une hélice induite par la montée de la dislocation vis conduirait à un ancrage dont la dureté est proche de celle du mécanisme d'Orowan et, en outre, sans possibilité d'activation thermique. Si cela se confirmait, il faudrait changer le traitement mésoscopique proposé dans ce mémoire afin de prendre en compte le caractère local de la dislocation.

## 5.3. Mécanisme d'Orowan à basse température

Les résultats obtenus grâce à nos simulations DD sont les premiers rapportés dans la littérature concernant le mécanisme d'Orowan à basse température. Nous avons montré que l'écart de mobilité entre les dislocations de différents caractères ne peut qu'abaisser le durcissement. Cependant, les valeurs obtenues pour le durcissement sont fonction du rapport de vitesse  $K$  entre les dislocations coin et vis. En effet, en fonction du matériau et de la température, ce coefficient est amené à changer, modifiant ainsi le durcissement. Il est donc intéressant de trouver les bornes du durcissement dans les deux limites suivantes.

Lorsque  $K$  tend vers le type 1, la mobilité des dislocations devient isotrope, c'est-à-dire indépendante du caractère. Quelle que soit la température, le durcissement d'Orowan correspondrait bien évidemment à celui du durcissement athermique, bien commenté dans la littérature [135].

En revanche, lorsque  $K$  tend vers l'infini, nous pouvons considérer que les frictions du réseau et d'alliage sur les dislocations non-vis s'annulent. Pour simplifier, nous considérons que la mobilité des dislocations non-vis est athermique et que les dislocations vis contrôlent toujours l'écoulement plastique. Si, à la vitesse de déformation imposée, la contrainte d'écoulement, sans particules, est  $\tau_c$ , alors nous cherchons le durcissement  $\tau_p$  provoqué par une distribution aléatoire de particules de taille  $D$  et de densité  $C$ . Dans ces conditions, le rayon  $R_m$  devient simplement égal à  $\mu b / \tau_c$  et l'espacement effectif à  $[DC (R_m + \frac{1}{2} D)]^{-1}$ . Pour une distribution



typique de carbures dans l'acier de cuve, seul l'effet de longueur subsiste. L'approximation adéquate de l'équation 4.23 donne la formule suivante du durcissement :

$$\tau_p = \tau_o \frac{2kT}{\Delta G_o} \ln \left[ l_o D C \left( \frac{\mu b}{\tau_c} + \frac{D}{2} \right) \right] \quad (4.28)$$

Ainsi, le durcissement d'Orowan à basse température varie d'une façon *logarithmique* avec la concentration et avec la taille des particules. De manière surprenante, à température constante, le durcissement *diminue* logarithmiquement en fonction de la contrainte critique. Lorsque la température diminue, le durcissement diminue également, en raison de la diminution du terme pré-logarithmique ainsi que l'augmentation de la contrainte critique. Les deux effets s'ajoutent pour faire disparaître le durcissement d'Orowan à très basse température.

En conclusion : **le durcissement d'Orowan tend vers zéro lorsque la température s'approche du zéro absolu.**

## 5.4. Pour résumer

Nous avons présenté dans ce mémoire un aperçu de notre démarche multi-échelle concernant le comportement mécanique des aciers des cuves et du fer. Bien que beaucoup de choses restent encore à faire, notamment la prise en compte des détails de la microstructure, nous constatons que cet aperçu commence à dessiner une image cohérente, aux contours bien définis. Nous avons montré que de nombreuses propriétés, comme la mobilité des dislocations ou l'interaction avec les cavités, doivent être caractérisées au moyen des simulations atomiques, étant donné l'influence prépondérante du caractère atomique de l'interaction.

Nous avons également mis en évidence que les simulations de DM, à condition de disposer d'un potentiel interatomique approprié, peuvent simuler les phénomènes physiques avec une grande précision. La concordance entre les résultats des simulations et de l'expérience concernant le taux d'activation du mécanisme de double-décrochement témoigne de la maturité actuelle des simulations et de la validité des méthodes de transition mises en œuvre. Cet accord autorise à faire confiance aux résultats de ces méthodes dans les cas où les données expérimentales font défaut, comme la mobilité de la dislocation coin dans les plans {112} ou l'énergie d'activation pour le désancrage des cavités.

Dans les rares cas où la contribution des simulations atomiques n'est pas indispensable, comme pour le mécanisme d'Orowan, les simulations DD montrent leur efficacité dans la prédiction du durcissement. Ce type d'information se révèle indispensable aux échelles supérieures. En effet, les simulations DD sont les seules à pouvoir rendre compte de la microstructure réelle et à pouvoir reproduire plusieurs de ses degrés de liberté.

Tous ces résultats ont été obtenus sans variable ou paramètre ajusté. La démarche des simulations multi-échelles proposée permet, en outre, de contourner la nécessité d'utiliser des modèles théoriques trop simplistes ou trop sophistiqués pour les phénomènes étudiés. En focalisant nos efforts sur la démarche multi-échelle, nous avons pu concevoir des simulations et analyser les résultats à une échelle donnée afin d'alimenter les simulations à l'échelle supérieure. Sans cette démarche, la plupart des résultats, surtout ceux réalisés à l'échelle atomique, restent prisonniers d'une description qualitative difficile à exploiter.

## 5.5. Beaucoup de choses restent à faire ...

Notre tâche consistant à faire dialoguer les échelles n'est pas une affaire simple, avec des outils bien rodés. Pionnier parmi quelques autres sur cette piste, nous avons encore beaucoup de modifications et d'améliorations à apporter, à plus ou moins long terme. Plusieurs domaines à investir ou approfondir peuvent être cités :

- **Etudier l'interaction avec les obstacles cisailables**

Dans la méthode proposée dans ce mémoire, nous avons souligné que la contrainte critique d'interaction fluctue en fonction de la configuration des segments à l'intérieur du précipité ou dans la cavité. Il n'est pas facile de rapprocher cette configuration de la forme de la dislocation en DM étant donné la forte modification de la structure du cœur de la dislocation. Nous devons donc résoudre ce problème afin de rationaliser l'interaction en termes de contraintes effectives ainsi qu'en termes de tension de ligne locale.

- **Reproduire le résultat des interactions en DD**

En DM, l'interaction conduit à une modification structurale de l'obstacle, comme le cisaillement, modification de structure cristallographique des précipités de Cu dans le fer, diminution de la taille de la cavité en raison de l'absorption de lacunes par la dislocation. Si l'on s'intéresse uniquement à la première interaction pour simuler la limite d'élasticité, la prise en compte de ces modifications dans la DD n'est pas nécessaire.

En revanche, si nous visons la modélisation de la localisation de la déformation, la modification des formes des obstacles doit être fidèlement reproduite en simulation DD. Ceci reste une tâche difficile à mettre en œuvre compte tenu du caractère atomique de ces modifications.

- **Explorer l'activation thermique à basses contraintes**

Comme nous l'avons expliqué dans le chapitre dédié aux méthodes de transition, comparées à l'expérience, les conditions de simulation en DM conduisent à une perte nette d'énergie d'activation thermique. Typiquement, nous avons vu que  $\Delta G$  est égale à 25 - 30  $kT$  dans l'expérience alors que, dans les simulations DM,  $\Delta G$  est de l'ordre de 8 à 9  $kT$ . Lorsque le niveau d'énergie mis en jeu est faible, comme la barrière de Peierls de la dislocation coin ou l'interaction avec les atomes de solutés, il suffit d'augmenter la température pour couvrir l'intervalle de variation de  $\Delta G$ . En revanche, pour les obstacles très durs, il est très difficile d'explorer le régime à basses contraintes. Comme nous l'avons précisé dans le cas de la dislocation vis avec une barrière de 0.85 eV, l'augmentation de la température ne suffit plus à réduire fortement la contrainte effective. Il s'agit donc d'un des défis majeurs des simulations DM du futur.

- **Prendre en compte les interactions élastiques dans les méthodes de transition**

A ce stade du développement des méthodes de transition, seules les interactions de contact ont été considérées dans nos analyses. Il existe des cas où les interactions élastiques sont importantes, comme pour le carbone interstitiel dans le fer. Le traitement multi-échelle doit désormais rendre compte du caractère non-local de l'interaction, ce qui est une tâche relativement complexe. Elle n'a pas encore été abordée dans la littérature en raison du manque

de données. Cependant, ces mêmes données peuvent être facilement produites par les simulations actuelles de DM. L'enjeu est donc de déterminer l'énergie d'activation en fonction de la contrainte effective (locale) et, ensuite, d'étendre l'étude en DD afin de comprendre l'évolution de la contrainte effective en fonction de la température. Ce traitement devra naturellement déboucher sur la notion de seuil *athermique* de l'interaction en fonction de la vitesse de chargement.

## 5.6. Perspectives de recherches

Au-delà des améliorations discutées ci-dessus, de nouveaux objectifs se précisent, à plus ou moins long terme, en fonction de l'état actuel de nos travaux.

- **Prédire le durcissement induit par les boucles de dislocations**

Les boucles de dislocations formées sous irradiation, qu'elles soient prismatiques ou glissiles, constituent des obstacles forts au mouvement des dislocations. La nature de l'interaction fait intervenir, d'une part, les propriétés élastiques des dislocations et, d'autre part, le comportement du cœur, de nature purement atomique. Ce dernier implique parfois des phénomènes diffusifs non conservateurs (rotation du vecteur de Burgers, montée des dislocations), difficiles à coupler à l'état mécanique du chargement. Aucun modèle théorique ne permet actuellement de prédire ni le résultat ni la force de telles interactions.

En outre, en raison de l'implication de ces processus diffusifs, et contrairement aux jonctions entre les lignes de dislocations, la nature et la force de ces interactions varient fortement avec la température. Ceci nécessite la prise en charge de l'activation thermique dans la modélisation. Dans ces conditions, nous ne pouvons pas nous fonder sur la simple approche locale d'Arrhenius. Par ailleurs, contrairement aux autres types de défauts de nature statique, les boucles de dislocations se caractérisent par une mobilité relativement élevée, qui dépend des éléments d'alliage en solution solide ou en amas. Or, cette mobilité modifie la concentration effective des boucles sur le plan de glissement. Ce facteur, bien que déterminant, n'a pas été étudié jusqu'à nos jours.

- **Approche multi-échelle pour l'étude de la Loi de Hall-Petch**

Il s'agit de déterminer la composante intergranulaire de la contrainte d'écoulement des matériaux polycristallins. La base physique de la loi de Hall-Petch, bien que la loi soit connue depuis de nombreuses décennies, n'est pas encore bien établie. Or, il s'agit d'un mécanisme important aux frontières de toutes les approches : dynamique des dislocations (échelle mésoscopique), éléments finis (calcul d'agrégats), méthodes d'homogénéisation, etc.

La difficulté principale réside dans la complexité de l'interaction dislocations-joints de grains, du fait du nombre élevé de degrés de liberté de l'interaction et de la grande variété des structures atomiques des joints. Le caractère impénétrable de l'interface a, en effet, montré ses limites. Entre absorption, attraction et répulsion, il est difficile de construire un critère explicite traduisant le seuil de transmission intergranulaire du glissement cristallographique. Cette étude est indispensable à la prédiction du durcissement intergranulaire sous irradiation, compte tenu des phénomènes de ségrégations chimiques induites ou accélérées par irradiation.

- **Comportement des dislocations en alliages concentrés**

La forte concentration d'éléments d'alliage, comme dans le cas des aciers austénitiques, conduit parfois à une transformation allotropique. La caractérisation du comportement des dislocations dans ces matériaux est complexe en raison de l'effet de la fluctuation locale de la concentration de la matrice. Ce projet vise à modéliser et simuler à l'échelle atomique le comportement des dislocations dans le fer de structure CFC. La présence du nickel et la forte baisse de l'énergie de faute d'empilement provoquent une modification radicale des propriétés mécaniques locales. Les travaux prévus dans les années à venir concernent l'identification des caractéristiques de ces alliages par rapport aux éléments purs de structure CFC, comme le cuivre ou le nickel. Par exemple : les conditions conduisant à l'extension des fautes d'empilement observée dans ces alliages et le critère d'activation du maillage, au détriment du mouvement visqueux des dislocations parfaites.

- **Couplage dynamique des dislocations – diffusion atomique**

Concernant les mécanismes du fluage et du vieillissement statique et dynamique, le comportement des dislocations est fortement affecté par la diffusion des atomes ou des lacunes. Or, actuellement, les approches dédiées à ces mécanismes sont complètement séparées. Il s'agit certainement d'un défi majeur dans la modélisation du comportement mécanique à base de simulations multi-échelles. La difficulté réside dans l'écart conséquent entre échelles de l'espace-temps associées. L'interaction avec les éléments en solution solide fait intervenir les propriétés de cœur des dislocations. Si la DM se révèle la plus appropriée pour prédire le comportement du cœur, elle reste, actuellement, incapable de s'attaquer à la diffusion, même celle aussi rapide du carbone dans le fer. Par ailleurs, la DD, à condition d'intégrer correctement les résultats des simulations atomiques, pourrait rendre compte simultanément de la montée et du glissement des dislocations. Des problèmes numériques apparaîtront probablement en raison de l'écart important de mobilité dans les deux cas.



## 6. Références

- 
- [1] Mohamed G, Bacroix B, Ungar T, Raphanel JL., *Mat. Sci. Eng. A* 234-236 (1997) 940
  - [2] Monnet G, Bacroix B, Lebrun JL, Ungar T, *Metal. Mat. Trans.*, 33A (2002) 591
  - [3] Groma I, Monnet G, *Journal of Appl. Cryst.* 35 (2002) 589
  - [4] Mohamed G, Bacroix B, *Acta Mat.* 48 (2000) 3295
  - [5] Monnet G, Devincre B, Kubin LP, *Acta Mat.*, 52 (2004)4317
  - [6] Monnet G, *Phil. Mag.*, 86 (2006) 5927
  - [7] Odette G R, T. Yamamoto a, H.J. Rathbun a, M.Y. He a, M.L. Hribernik a, J.W. Rensman, *J. Nucl. Mat.* 323 (2003) 313–340
  - [8] Bhadeshia H, *Bainite in Steels*, IOM Communications, London, 2001
  - [9] Bacon DJ, Osetsky Y, Rodney D, in *Dislocations in Solids*, Vol. 15, J.P. Hirth and L. Kubin eds., Elsevier, Amsterdam, 2009
  - [10] Queyreau S., *Thèse de Paris 6*, Février, 2008
  - [11] Kocks UF, Mecking H, *Prog. Mat. Sci.* 48 (2003) 171
  - [12] Devincre B, Hoc T, Kubin L, *Science*, 320 (2008) 1745
  - [13] Domain C, Monnet G, *Phys. Rev. Lett.* 95 (2005) 215506
  - [14] Gröger R, Bailey AG, Vitek V, *Acta Mat.* 56 (2008) 5401
  - [15] Kubin LP, *Reviews on the Deformation Behavior of Materials* 1 (1976) 243.
  - [16] Jaoul B, Gonzalez D, *J. Mech. Phys. Solids* 9 (1960) 16
  - [17] Weller M, *Mater Sci Forum*, 95 (2001) 366–368
  - [18] Clouet E, Garruchet S, Nguyen H, Perez M, Becquart C, *Acta Mat.* 56 (2008) 3450
  - [19] Madec R, Kubin L P, *Solid mechanics and its applications*, 115 (2005) 69-78
  - [20] Yamaguchi M, Vitek V. *J Phys F Metall Phys*, 5 (1975)11
  - [21] Bulatov VV, Cai W. *Computer simulations of dislocations*. Oxford: University press; 2006
  - [22] Parr RG, Yang W, *Density Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford Univeristy Press, (1989),
  - [23] Ghoniem NM, *Phil. Mag.* 83 (2003) 3475
  - [24] Moriarty J A, Belak J F, Rudd R E, Söderlind P, Streitz F H, Yang L H, *J. Phys. Condens. Matter* 14 (2002) 2825
  - [25] Pizzagalli L, Godet J, Brochard S, *PRL* 103 (2009) 065505
  - [26] Woodward C and Rao S. I., *Philos. Mag. A* 81 (2001) 1305
  - [27] Woodward C and Rao S. I., *Phys. Rev. Lett.* 88 (2002) 216402
  - [28] Ventelon L, Willaime F, *J Computer-Aided Mater Des*, 14 (2007) 85–94
  - [29] Ackland GJ, Bacon DJ, Calder AF, Harry T. *Phil Mag A* 75 (1997) 713
  - [30] Marian J, Cai W, Bulatov V V, *Nat. Mater.* 3 (2004) 158
  - [31] Ngan A H W, Wen M., *Computational Materials Science* 23 (2002) 139
  - [32] Mendeleev M I, Han S W, Srolovitz D J, Ackland G J, Sun D Y, Asta M, *Philos. Mag.* 83 (2003) 3977
  - [33] Ackland GJ, Mendeleev MI, Srolovitz DJ, Han D and Barashev AV, *J. Phys. Condens. Matter* 16 (2004) 1
  - [34] Chaussidon J, Fivel M, Rodney D, *Acta Materialia* 54 (2006) 3407
  - [35] Terentyev D, Bacon DJ, Osetsky Yu N. *J Phys Condens Matter*, 20 (2008) 445007
  - [36] Monnet G., *Acta Mat.* 55 ( 2007) 5081 –5088
  - [37] Osetsky Yu N, Bacon D, *J. Model Simul Mater Sci Eng* 11 (2003) 427

- 
- [38] Terentyev D, Bonny G, Malerba L, *Acta Mat.* 56 (2008) 3229
- [39] Hu S, Schmauder S, Chen L, *Phys. Stat. Sol. (b)* 220 (2000) 845
- [40] Peierls RE, *Proc. Phys. Soc.* 52 (1940) 23
- [41] Nabarro FRN, *Proc. Phys. Soc.* 59 (1947) 256
- [42] Orowan E, *Z. Phys.*, 89: 605(1934) 634
- [43] Polanyi M, *Z. Phys.*, 89 (1934) 660
- [44] Taylor GI, *Proc. Roy. Soc.* A145 (1934) 362
- [45] Christian JW, Vitek V, *Rep. Prog. Phys.* 33 (1970) 307
- [46] Bulatov VV, Kaxiras E. *Phys Rev Lett* 78 (1997) 4221
- [47] Monnet G., Tarentyev D., *Acta Materiala* 57 ( 2009) 1416
- [48] Domain C, communication privée.
- [49] Yamaguchi M, Vitek V, *J. Phys. F: Met. Phys.* 5 (1975) 1
- [50] Yamaguchi M, Vitek V, *J. Phys. F: Met. Phys.* 5 (1975) 11
- [51] Franciosi P., Berveiller M., Zaoui A., *Acta Met.* 28 (1980) 273–283
- [52] Taoka T., Takeuchi S, Furubayashi E, *J. Phys. Soc Japan* 19 (1964) 701
- [53] Scattergood RO, Bacon DJ, *Phys. Stat. Sol. a* 25 (1974) 395
- [54] Bacon DJ. in *Fundamentals of Deformation and Fracture.* eds Bilby B A, Miller K J and Willis J R. C.U.P. (1985) 401
- [55] De Wit G, Koehler JS. *Phys Rev* 116 (1959) 1113
- [56] Nabarro FRN. In: McQueen HJ et al., editors. *Strength of metals and alloys, Vol. 3* Oxford: Pergamon Press; 1986. p. 1667
- [57] Mitchell TE. *Prog Appl Mater Res* 6 (1964) 117
- [58] Christian J.W., *Metall. Trans. A* 14A (1983) 1237
- [59] Khater H, *Twin Boundaries and Other Defects in HCP Metals Studied by Computer Simulation*, PhD of the University of Liverpool, December 2008
- [60] Seeger A. *Philos Mag* 1 (1956) 651
- [61] Seeger A. and P. Schiller, *Acta Metall.* 10 (1962) 348
- [62] Lothe J, *Phys. Rev.* 15 (1959) 543
- [63] Seeger A, *Dislocations 1984; Aussois; France; 8-17 Mar. 1984*
- [64] Monnet G, Domain C, Queyreau S, Naamane S, Devincre B, *J. Nucl. Mater.* 394 (2009) 174
- [65] Monnet G., Y. Osetsky, D.J Bacon, *Phil. Mag.* 2009, *Phil. Mag.* DOI: 10.1080/14786430903117133
- [66] Hazzledine PM, Karnthaler HP, Korner A. *Phys Status Solidi a* 81 (1984) 473
- [67] Dupuy L, Fivel MC, *Acta Materialia* 50 (2002) 4873–4885
- [68] Hirth JP, Lothe J. *Theory of dislocations.* New York: Wiley; 1982
- [69] Schoeck G, *Phys. Stat. Sol.* 8 (1965) 499
- [70] Hirth J P, Nix W D, *Phys. Stat. Sol.* 35 (1969)177
- [71] Friedel J, *Dislocations* (Pergamon Press, London, 1964), p. 31
- [72] Cagnon M, dans *Dislocation et Déformation Plastique*, Ecole d'été Yrivals 1979, Les Editions de la Physique
- [73] Kinney J J, in *Probability - an Introduction with Statistical Applications*, John Wiley & Sons, inc, 1997
- [74] Van Kampen N, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, North-Holland, Amsterdam, 1992
- [75] Monnet G, soumis à *Acta Materiala*
- [76] Rodney D, *Phys. Rev. B* 76 (2007) 144108
- [77] Zhu T, Li J, Samanta A, Leach A, Gall K, *Phys. Rev. Lett* 100, (2008) 025502
- [78] Ngan A H W, Zuo L, Wo P C, *Proc. R. Soc. A* 462 (2006 ) 1661

- 
- [79] Mason J K, Lund A C, Schuh C A, Phys. Rev. B, 73, (2006) 054102
- [80] Vineyard G, J. Phys. Chem. Solids 3 (1957) 121
- [81] Glyde H R, Rev. Modern Phys. 39 (1967) 373
- [82] Frank W, Z. Naturforschg. 22a (1967) 365
- [83] Celli V, Kabler M, Ninomiya T, Thomson R, Phys. Rev. 131 (1963) 58
- [84] Frank W, Phys. Stat. Sol. 26 (1968) 197
- [85] Louchet, F., Kubin, L. P. and Vesely, D., Phil. Mag. A, 39 (1979) 433
- [86] Tang, M., Kubin, L.P., Canova, G.R., Acta Mat. 46 (1998.) 3221
- [87] Dorn J E, Rajnak S, Trans. Metall. Soc. AIME 230, (1964) 1052
- [88] Granato A V, Lucke K, Schlipf J, Teutonico L J, J. Appl. Phys. 35 (1964) 2732
- [89] Pizzagalli L, Pedersen A, Arnaldsson A, Jónsson H, Beauchamp P, Phys. Rev. B 77 (2008) 064106
- [90] Naamane S, Monnet G, Devincere B, Int. J. of Plasticity 26 (2010) 84–92
- [91] Naamane S, thèse de Doctorat de l'Université Paris 6, Juillet 2008
- [92] Takeuchi T, Trans. Iron Steel Inst. Jpn. 8 (1968) 251
- [93] Spitzig W A, Keh A S, Acta Metall. 18 (1970) 611
- [94] Solomon H D, McMahon C J, Jr., Acta Metall. 19 (1971) 291
- [95] Spitzig W A, Mater. Sci. Eng. 12 (1973) 191
- [96] Cagnon M, Philos. Mag. 24 (1971) 1465
- [97] Monnet G., Devincere B. Philosophical Magazine, 86 (2006) 1555
- [98] Tapasa K, Osetsky Yu N, Bacon D J, Acta Materialia 55 (2007) 93
- [99] Mills D, Craig GB. Trans Metal Soc AIME 242 (1968) 1881
- [100] Naka S, Lasalmonie A, Costa P, Kubin LP. Phil Mag A 57 (1988) 717
- [101] Kubin L P, Louchet F, Acta Met. Acta Met. 27 (1979) 337
- [102] Kubin L P, Louchet F, Peyrade J P, Groh P, Cottu J P, Acta Met. 27 (1979) 343
- [103] Brown L M, Phil. Mag. 10 (1964) 441
- [104] de Wit R, Physica status solidi 20 (1967) 567
- [105] de Wit R, Physica status solidi 20 (1967) 575
- [106] Bacon D J, Physica status solidi 23 (1967) 527
- [107] Foreman A J E, Phil. Mag. 15 (1967) 1011
- [108] Bacon D J, Kocks U F, Scattergood R O, Philos. Mag. 28 (1973) 1241
- [109] Scattergood RO, Bacon DJ, Phil. Mag., 31 (1975) 179
- [110] Scattergood RO, Bacon DJ, Acta Metall 30 (1982)1665
- [111] Devincere B, Condat M, Acta metall, mater.,40 (1992) 2629
- [112] Mason W P, Piezoelectric Crystals and Their Applications to Ultrasonics, Van Nostrand, New York, 1950
- [113] Han X, Ghoniem NM, Wang Z, Phil. Mag. 83 (2003) 3705
- [114] Urabe N, Weertman J, Mat. Sci. Eng. 18 (1975) 41
- [115] Lothe J, J. Aapl. Phys. 33 (1962)2116
- [116] Fusenig K D, Nembach E, Acta Met. Mat 41 (1993) 3181
- [117] Nabarro FRN, Phil. Mag. 83 (2003) 3047
- [118] Naamane S, thèse de doctorat de l'université Paris 6, Juillet 2008
- [119] Wickham LK, Schwarz K, Stölken JS, Phys. Rev. Lett. 83 (1999) 4574
- [120] Kubin LP, Madec R, Devincere B, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 779 (2003) W1.6.1
- [121] Madec R, Thèse de doctorat de l'Université Paris XI, décembre 2001
- [122] Saada G, Acta Metall. 8 (1960) 841
- [123] Schoeck G, Frydman R, Phys. Stat. Sol. (b) 53 (1972) 661
- [124] Basinski SJ, Basinski ZJ, Dislocations in Solids, ed. FRN Nabarro, North Holland, 4 (1979) 261



- 
- [125] Hansen N, Huang X, *Acta Mater.* 46, (1998) 1827
- [126] Madec R, Devincere B, Kubin L P, *Phys. Rev. Lett.* 89, (2002) 255508
- [127] Queyreau S, Monnet G, Devincere B, *Int. J. Plasticity*, 25 ( 2009) 361
- [128] Proville L, Rodney D, Brechet Y, Martin G, *Phil. Mag.* 86 (2006) 3893
- [129] Jaoul B et Crussard C, dans *Etude de la plasticité et application aux métaux*, Ecole des Mines de Paris 2008
- [130] Madec R, Devincere B, Kubin LP, Hoc T, Rodney D, *Science* 301 (2003) 1879
- [131] Orowan E, *Symposium on Internal Stresses in Metals and Alloys*, The Institute of Metals, London, (1948) 451
- [132] Mohles V, Ronnpagel DR, Nembach E, *Comp. Mater. Science* 16 (1999) 144
- [133] Foreman AJE, Makin MJ, *Phil. Mag.* 13 (1966) 911
- [134] Kocks UF, *Can. J. Phys.* 45 (1967) 737
- [135] Nembach E, *Particle Strengthening of Metals and Alloys*, Wiley, New York, 1996
- [136] Mohles V, Nembach E, *Acta Mat.* 49 (2001) 2405
- [137] Fichtorn K, Weinberg WH, *J. Chem. Phys.* 95 (1991) 1090
- [138] Terentyev D, Malerba L, Bacon D J, Osetsky Yu N, *J. Phys. Condens. Matter* 19 (2007) 456211
- [139] Bacon D J, Osetsky Yu N, *Mat. Sci. Eng. A* 400–401 (2005) 353
- [140] Gröger R, Vitek V, *Acta Mat.* 56 (2008) 5426