

## TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION .....	15
I. RAPPELS BIBLIOGRAPHIQUES .....	21
I-1. RELATION ENTRE ÉCOULEMENT PLASTIQUE ET MICROSTRUCTURE .....	21
A. Populations de dislocations.....	22
B. La contrainte interne .....	22
C. Expressions phénoménologiques .....	24
I-2. DURCISSEMENT DES CRISTAUX CFC EN SOLlicitATION UNIAXIALE .....	26
A. Effet de la vitesse de déformation et de la température .....	27
B. Stades de déformation .....	29
I-3. MODÈLES D'ORGANISATION DES DISLOCATIONS .....	34
A. Le modèle de Taylor .....	35
B. Modèles énergétiques et approches "thermodynamiques" .....	36
C. Le Modèle de Holt et l'analyse de stabilité linéaire .....	37
D. Le modèle statistique de Kocks .....	38
E. Modèles de réaction-diffusion et dérivés.....	39
I-4. SIMULATIONS DE LA DYNAMIQUE DES DISLOCATIONS .....	41
A. Simulations de l'écoulement plastique .....	41
B. Simulations de microstructures à deux dimensions .....	43
II. DISCRÉTISATION DES LIGNES DE DISLOCATION .....	51
II-1. DISCRÉTISATION DE L'ESPACE .....	51
II-2. DISCRÉTISATION DES LIGNES DE DISLOCATIONS : LE MODÈLE "COIN-VIS" .....	53
II-3. CALCUL DES FORCES .....	57
A. Interactions élastiques.....	57
B. Force appliquée à une dislocation.....	62
II-4. VALIDATION DU MODÈLE DE DISLOCATIONS "COIN-VIS" .....	66
III. MÉTHODE DE SIMULATION DE LA DYNAMIQUE DES DISLOCATIONS .....	75
III-1. ÉQUATION DU MOUVEMENT .....	75
A. Lois de mouvement .....	75
B. Dynamique du temps de vol .....	76
C. Détermination du pas de temps élémentaire .....	78

III-2. RÉACTION ENTRE DISLOCATIONS .....	80
A. Réaction entre deux segments de dislocation coplanaires .....	81
B. Réactions entre segments de dislocation non-coplanaires .....	83
III-3. LE GLISSEMENT DÉVIÉ .....	86
III-4. CONDITIONS INITIALES .....	89
III-5. CONDITIONS AUX LIMITES .....	91
III-6. CALCUL DE LA DÉFORMATION ET CONDITIONS DE SOLLICITATIONS .....	93
III-7. OUTILS D'ANALYSE DE LA SIMULATION .....	96
IV. ÉCOULEMENT PLASTIQUE "LAMINAIRE" .....	101
IV-1. CONDITIONS DE SIMULATION .....	101
IV-2. RÉSULTATS .....	103
A. Microstructures relaxées et dynamiques .....	103
B. Caractérisation et propriétés des microstructures .....	105
IV-3. MODÈLE PHÉNOMÉNOLOGIQUE .....	108
IV-4. CONCLUSIONS .....	113
V. ÉCOULEMENT PLASTIQUE "TURBULENT" .....	117
V-1. SIMULATIONS DU GLISSEMENT DOUBLE EN 2-D .....	117
A. Conditions des simulations .....	117
B. Caractérisation des microstructures .....	119
C. Discussion.....	122
V-2. SIMULATIONS TRIDIMENSIONNELLES : PROPRIÉTÉS MÉCANIQUES.....	123
A. Courbes de déformation .....	123
B. Influence de la stabilité des jonctions .....	127
C. Autres propriétés.....	128
V-3. RELATION ENTRE ÉCOULEMENT PLASTIQUE ET ORGANISATION DES DISLOCATIONS .....	132
A. Franchissement de la forêt par une dislocation isolée .....	133
B. Franchissement de la forêt en 3-D .....	135
V-4. SIMULATIONS EN 3-D : ORGANISATION MÉSCOSCOPIQUE.....	138
V-5. CONCLUSION.....	143
CONCLUSION GÉNÉRALE ET PROSPECTIVE .....	147

ANNEXE I

Expression du tenseur de contrainte d'un segment de dislocation rectiligne.. 153

ANNEXE II

Résolution des équations du mouvement par glissement..... 155

ANNEXE III

Paramètres d'entrée de la simulation ..... 159

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES ..... 163



# **INTRODUCTION**



## INTRODUCTION

Au cours de ces dernières décennies, la théorie des dislocations a permis de comprendre les mécanismes à l'origine de la déformation plastique des matériaux cristallins. Son élaboration est le résultat d'une intense activité théorique, couplée au développement de nouveaux moyens d'investigation comme la microscopie électronique. Cependant, à cause de la complexité des phénomènes physiques mis en jeu, la relation entre les propriétés microscopiques des dislocations et le comportement mécanique macroscopique des matériaux n'est pas complètement réalisée. La distance qui sépare les points de vue du physicien des métaux et du mécanicien tend actuellement à se réduire. On note cependant qu'elle croît avec le taux de déformation plastique considéré.

L'évolution temporelle d'une distribution de dislocations reste difficile à prévoir car la déformation plastique résulte de l'action simultanée d'un grand nombre de mécanismes élémentaires. D'autre part, l'interaction dislocation-dislocation reste difficile à traiter sur le plan théorique dès que la densité de défauts devient grande, en raison de la longue portée des interactions. Enfin les interactions à courte distance ajoutent des non linéarités supplémentaires. Le fait essentiel est que les dislocations ont tendance à s'auto-organiser pour former une grande diversité de microstructures (cellules, veines, parois, etc.). Celles-ci répondent à des lois d'échelle universelles dont l'origine n'est pas toujours bien comprise.

Les dislocations sont des défauts cristallins de forte énergie (quelques eV par atome) mais de très faible masse effective, équivalente à la masse d'une ligne atomique. Nous sommes donc en présence d'un système physique où la contribution de l'énergie potentielle à l'énergie totale est beaucoup plus grande que celle de l'énergie cinétique. En aucun cas, il n'est possible de réduire l'évolution d'une distribution de dislocations, à la somme de contributions indépendantes (approximation de champ moyen). En l'absence d'un écrantage parfait de leur champ de déformation élastique, les dislocations interagissent sur des distances de l'ordre du micromètre. A la frontière des échelles microscopique et macroscopique, ces interactions définissent une troisième échelle importante, l'échelle mésoscopique d'où émergent les fortes fluctuations spatiales de la densité de dislocations à l'origine des microstructures.

Par ailleurs, la déformation plastique est un phénomène irréversible. L'énergie injectée pour déformer un échantillon cristallin est en grande partie dissipée sous forme de chaleur, ce qui maintient en permanence le système sollicité loin de tout état d'équilibre. Dans ces conditions, l'apparition d'instabilités spatio-temporelles n'est pas surprenante si l'on se réfère à des situations semblables comme celles de l'hydrodynamique en milieu confiné ou de certaines réactions chimiques couplées.

Depuis moins d'une décennie, deux nouvelles approches complémentaires de la plasticité ont été développées, par analogie avec les études menées sur d'autres systèmes dissipatifs. Les modèles de "réaction-diffusion" s'inspirent de manière phénoménologique de l'étude des horloges chimiques. Les simulations numériques mésoscopiques à deux dimensions dérivent, pour leur part, des études de gaz sur réseaux. Les motivations de ces derniers travaux sont doubles. D'un point de vue fondamental, il s'agit de comprendre quels sont les mécanismes élémentaires conduisant à la formation d'une microstructure organisée. D'autre part, la connaissance du nombre minimum de paramètres physiques nécessaires aux modèles numériques doit permettre d'expliquer l'origine d'un certain nombre de propriétés remarquables. Parmi celles-ci, on compte le "principe de similitude", selon lequel la longueur d'onde caractéristique des microstructures est inversement proportionnelle à la racine carrée de la densité de dislocations ou à la contrainte.

Dans l'étude des systèmes complexes, les méthodes de simulation numérique sont en voie d'acquiescer une place aussi importante que les deux approches traditionnelles que sont la théorie et l'expérience. A la frontière entre ces deux approches, les simulations jouent un rôle essentiel. En effet, les approches théoriques font fréquemment appel à des approximations importantes, parfois difficiles à justifier. D'autre part, les interprétations expérimentales sont souvent délicates à cause de la complexité des systèmes réels qui font intervenir de nombreux paramètres. La réalisation d'expériences de laboratoire sur les systèmes idéaux employés par le théoricien peut alors s'avérer totalement impossible. Les modélisations numériques permettent de réaliser des calculs exacts sur de tels systèmes idéaux. Elles constituent des "expériences à l'ordinateur" équivalentes à des expériences de laboratoire, au cours desquelles il est possible de contrôler les paramètres du système étudié et de tester des hypothèses simplificatrices.

Cependant, les techniques de simulation ne se limitent pas à ce seul rôle. Comme le montre leur influence croissante dans le monde industriel, elles peuvent être un outil de prédiction quantitatif des propriétés physiques. De plus en plus, elles se substituent en partie à l'expérience réelle, lorsque le coût de celle-ci est grand ou lorsqu'on a besoin de mesurer des grandeurs physiques dans des conditions expérimentales extrêmes (très hautes températures, hautes pressions, systèmes explosifs, ...).

Dans le cas qui nous concerne, les simulations jouent un rôle prédictif ou comparatif avec l'expérience par le lien qu'elles permettent d'établir entre l'existence d'une microstructure et le comportement mécanique des matériaux. Aujourd'hui, on utilise couramment dans les codes d'éléments finis des lois de comportement qui ne contiennent aucune longueur d'échelle caractéristique. L'élaboration de ces nouvelles simulations vise donc à combler le fossé qui sépare l'échelle atomique et le plus petit élément de volume nécessaire à l'approche de l'ingénieur.



Au cours du présent travail, nous avons réalisé une étude par simulation numérique des propriétés dynamiques des dislocations dans un matériau modèle. Ce travail s'inscrit dans la continuité des premières simulations à deux puis trois dimensions proposées respectivement par J. Lépinoux et L. Kubin et G. Canova et L. Kubin, afin d'étudier les mécanismes d'auto-organisation des dislocations à une échelle mésoscopique. Notre choix s'est préférentiellement porté sur des matériaux de structure CFC où le nombre important d'études expérimentales sur monocristaux, permet une comparaison entre théorie et expérience.

Notre premier objectif a été de montrer que l'on pouvait tenir compte de manière raisonnable de tous les mécanismes élémentaires qui participent à la formation d'une microstructure auto-organisée. Nous avons ensuite tenté de tirer un certain nombre de conséquences physiques à partir d' "essais sur ordinateur" ainsi réalisés. Nous ne développons pas dans ce qui suit les aspects purement informatiques de la simulation. Ceux-ci n'en sont pas moins complexes, les difficultés classiques de ce genre d'entreprise se trouvant augmentées par les propriétés particulières des défauts que nous considérons. Nous aurons également l'occasion de souligner que les capacités de calcul actuellement disponibles ne sont pas encore tout à fait suffisantes pour nous permettre d'atteindre tous les objectifs fixés.

Le premier chapitre de ce mémoire établit une revue de nos connaissances expérimentales sur les principaux paramètres gouvernant la plasticité des métaux CFC. Nous rappelons brièvement les principaux modèles théoriques traitant de l'auto-organisation des dislocations, ainsi que les résultats marquants des précédentes études de modélisation numérique en deux dimensions.

Les chapitres II et III, sont ensuite consacrés aux définitions du modèle de discrétisation des lignes de dislocations, à sa validation et à la technique de simulation. Cette dernière permet une étude des propriétés collectives des dislocations à l'échelle spatiale où apparaissent les microstructures.

Enfin, aux chapitres IV et V, les résultats de simulations de la plasticité en deux et trois dimensions sont discutés et comparés avec l'expérience. Plus particulièrement, les mécanismes à l'origine du durcissement plastique et de la formation d'une microstructure de dislocations sont comparés aux hypothèses et aux prédictions des modèles théoriques.



# CHAPITRE I

## RAPPELS BIBLIOGRAPHIQUES



## I. RAPPELS BIBLIOGRAPHIQUES

Ce chapitre, préambule à notre travail, a un double objectif. D'une part, il donne un tour d'horizon succinct des connaissances expérimentales et théoriques sur certains aspects de la plasticité étudiés dans la suite de ce texte. D'autre part, il permet d'établir "l'état de l'art" sur certaines propriétés que nous rediscutons plus loin sous l'éclairage des résultats de notre travail.

Nous commençons par des rappels généraux sur la déformation plastique et les propriétés collectives des dislocations. Ensuite, les relations entre les propriétés mécaniques et les microstructures de dislocations dans les monocristaux de structure CFC, matériaux de référence de notre étude, sont détaillées. Les effets de quelques paramètres, liés aux conditions expérimentales ou intrinsèques aux dislocations, sont ainsi dégagés de la littérature. Ce sont les paramètres importants de notre simulation. Nous discutons ensuite la méthodologie et les résultats des principaux modèles proposés pour expliquer la formation de microstructures de dislocations auto-organisées. Enfin, une revue critique des précédentes études de la plasticité par simulation numérique est effectuée. Elle nous servira de guide dans l'élaboration d'une nouvelle méthode de simulation de la dynamique des dislocations et dans l'analyse des résultats de notre travail.

### I-1. RELATION ENTRE ÉCOULEMENT PLASTIQUE ET MICROSTRUCTURE

La déformation plastique à basse température (sans diffusion) résulte du glissement des dislocations sous l'effet de la contrainte appliquée. Des dislocations mobiles sans cesse renouvelées par des mécanismes de multiplication (par exemple les sources de Frank-Read) sont éliminées aux interfaces ou surfaces, ou annihilées par combinaison avec des dislocations de signe opposé. Cependant, cette élimination étant incomplète, un stockage important de lignes de dislocations immobiles a lieu pendant la déformation. Celles-ci sont bloquées par divers obstacles en particulier par interaction avec d'autres dislocations. Ces dislocations immobiles influencent le processus de déformation car d'une part leur champ de contraintes écran partiellement la contrainte appliquée et d'autre part elles constituent des obstacles au mouvement des dislocations mobiles. Ainsi, la contrainte d'écoulement est directement reliée à la densité totale de dislocations obstacles, ou dislocations de la forêt, intersectant les plans de glissement actifs. C'est pourquoi, les modèles phénoménologiques de la déformation plastique décomposent usuellement la description du phénomène global en deux parties : - le calcul de la contrainte d'écoulement pour une microstructure donnée, - la prédiction de l'évolution de cette microstructure pour chaque état de déformation afin d'aboutir à des modèles de durcissement d'écrouissage.

## A. Populations de dislocations

Il semble donc naturel de distinguer deux populations de dislocations, d'une part les dislocations mobiles et d'autre part les dislocations de la forêt (Friedel 1964), en général supposées immobiles. Les dislocations de la forêt, largement majoritaires, n'occupent qu'une fraction volumique faible du matériau car elles ont tendance à se rassembler en parois. Chacune de ces deux populations a ses propres cinétiques de création et de destruction. Les dislocations mobiles se multiplient par les mécanismes classiques de sources; elles peuvent s'annihiler mutuellement ou être immobilisées par le biais des interactions locales (formation de jonctions sessiles aux intersections, formation de configurations dipolaires). Les dislocations immobiles, quant à elles, sont sujettes à la restauration dynamique, par glissement dévié (ou montée) qui tend à limiter leur densité à une valeur maximale. Cette densité maximale est fonction du caractère des dislocations et elle est plus élevée pour les dislocations coin lorsque la température n'est pas suffisante pour activer la montée (Mughrabi 1988).

Lorsqu'on s'intéresse à l'arrangement spatial de la microstructure, une simple différenciation entre densités mobile et immobile peut paraître un peu sommaire. On définit alors des populations de dislocations constituées de sous-groupes qui partagent les mêmes propriétés de mouvement, de création ou d'annihilation. La densité totale de dislocations de la forêt peut ainsi être subdivisée en ensembles de dipôles, de multipôles ou de jonctions sessiles (Kratohvil 1988). En théorie cette différenciation doit être affinée jusqu'à une distinction entre dislocations de caractère et de vecteur de Burgers différents. A ce jour, cette complexité n'a pu être traitée dans son intégralité.

Le cas le plus attrayant pour l'approche théorique est en principe celui de la déformation cyclique de monocristaux orientés en glissement simple. Dans le cas du cuivre, de nombreuses sous-structures organisées sont formées (Mughrabi 1979, voir Magnin *et al.* 1984 pour une revue). Il n'y a alors qu'un seul vecteur de Burgers et deux caractères, vis et coin, à prendre en compte.

## B. La contrainte interne

La force motrice de l'écoulement plastique est fournie par la contrainte effective (Seeger 1955). Celle-ci résulte localement de la somme algébrique de la contrainte appliquée et de la contrainte interne. Cette dernière peut être considérée comme étant due aux interactions élastiques à grande distance et, à une échelle plus locale, à la tension de ligne.

Toute étude de l'évolution temporelle d'une population de dislocations doit nécessairement s'appuyer sur un calcul des interactions élastiques entre dislocations et de

l'influence de la contrainte effective sur la stabilité des microstructures. De nombreux exemples de tels calculs pour différents arrangements simples de dislocations peuvent être trouvés dans la littérature (Neumann 1986, Lubarda *et al.* 1993). Les configurations des dislocations mobiles peuvent conduire à des contraintes à longue distance, par exemple les empilements dynamiques. Ce n'est pas le cas pour celles des dislocations immobiles ou peu mobiles comme les arrangements multipolaires ou les sous-joints de polygonisation (fig. 1). Très schématiquement, il existe une tendance des dislocations à s'organiser spatialement, sous l'effet de leurs interactions élastiques, de manière à former des structures auto-écrantées. Ce comportement correspond à un abaissement de l'énergie élastique totale et est à l'origine de divers modèles énergétiques ou "thermodynamiques". Comme nous le verrons plus loin, de telles approches ne peuvent être appliquées qu'à des systèmes 'quasi-statiques' où les effets dynamiques dus à la contrainte appliquée sont très faibles devant la contribution de la contrainte interne.

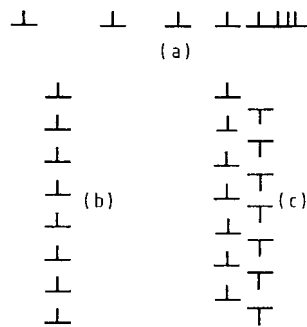


Fig. 1 : Exemples d'organisation élémentaire des dislocations. a) Empilement de dislocations, b) Sous-joint de polygonisation et c) mur dipolaire. (Kubin 1992)

De manière générale, la force interne qui s'exerce sur une dislocation dépend de la nature de son environnement dans une région définie théoriquement par un rayon de coupure au-delà du quel l'écrantage est supposé parfait. Le déplacement d'une dislocation à l'intérieur de ce rayon de coupure affecte l'ensemble des autres dislocations voisines. Chaque dislocation contribue ainsi à la contrainte interne, tout en réagissant elle-même à cette dernière.

C'est pourquoi, la contrainte interne n'est pas une grandeur locale, ce qui signifie que sa valeur en un point de l'espace dépend de l'arrangement de la microstructure dans un voisinage étendu. Le traitement mathématique de ce problème à N-corps représente la difficulté majeure de toutes les théories traitant des mécanismes d'auto-organisation des dislocations. Différentes approximations théoriques peuvent avoir tendance à exagérer le caractère à longue portée des états de contrainte ou au contraire favoriser les phénomènes d'auto-écrantage (Kubin 1992; Gulluoglu *et al.* 1989). Pour cette raison l'utilisation d'un

rayon de coupure lors du calcul des interactions élastiques à longue distance doit toujours être sujet à une attention particulière.

### C. Expressions phénoménologiques

L'inverse de la racine carrée de la densité de dislocations est un paramètre dimensionnel important, caractéristique de la distance moyenne entre dislocations appartenant à une distribution supposée faiblement hétérogène. Pour cette raison, il est souvent utilisé sous sa forme réduite  $b\rho^{1/2}$  dans les modèles d'écoulement plastique afin de définir l'effet moyen de la microstructure à densité constante. Il est alors comparé à  $\sigma_c/\mu$ , où  $\sigma_c$  est la contrainte d'écoulement et  $\mu$  le module de cisaillement du matériau. Expérimentalement, on trouve :

$$\sigma_c / \mu = \alpha b \rho^{1/2} . \quad (1)$$

où  $\alpha$  est une constante dont la valeur est de l'ordre de 0.3 pour le cuivre (fig. 2). Un travail de synthèse des résultats expérimentaux fait par Basinski et Basinski (1979) a permis de montrer que la valeur numérique de  $\alpha$  est relativement insensible au type de microstructure examiné. Sa valeur est toujours comprise entre 1/5 et 1/2, allant exceptionnellement jusqu'à 1 (NaCl).

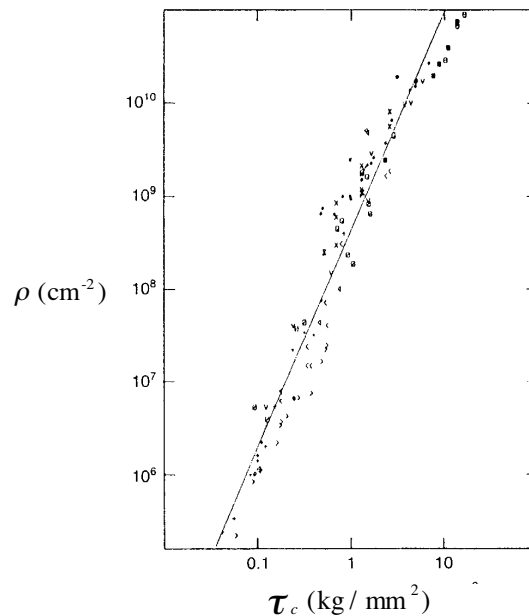


Fig. 2 : Compilation de données expérimentales sur la densité de dislocations de la forêt en fonction de la contrainte d'écoulement pour le cuivre et l'argent (Basinski et Basinski (1979). La droite de régression est définie par :  $\tau \propto \rho^{0.425}$ .



Grâce à sa nature a-dimensionnelle, l'équation (1) est utilisée dans le cadre de différents modèles d'écoulement plastique mais on peut dire qu'elle est bien comprise du point de vue physique. Elle dérive initialement du modèle de franchissement d'obstacles ponctuels par une ligne de dislocation, aussi appelé "modèle de la forêt" (Saada 1960, Friedel 1964). Dans ce cas, le coefficient  $\alpha$  tient essentiellement compte des effets de tension de ligne lorsque la dislocation se courbe entre deux arbres. Ce terme induit une faible déviation par rapport à la relation quadratique (1), en raison du facteur logarithmique contenu dans la tension de ligne. Une autre contribution à la valeur de  $\alpha$  (environ 20%) provient des interactions élastiques à longue distance (Saada 1960). En toute rigueur, donc, ce coefficient devrait évoluer avec la microstructure en cours de déformation. En pratique, sa variation semble suffisamment faible pour pouvoir être négligée en première approximation.

Une seconde équation phénoménologique importante et beaucoup plus intrigante, relie l'échelle spatiale caractéristique de la microstructure,  $\lambda$  (taille des cellules, distance entre parois, etc.), à la contrainte d'écoulement :

$$\sigma_c / \mu = K(b / \lambda). \quad (2)$$

Cette expression définit une nouvelle constante K ( $K \approx 10$ ), qui a souvent été supposée de caractère universel. Cependant, il n'en n'est rien (Mughrabi 1986) car dans de nombreux matériaux à énergie de faute faible (par exemple les aciers inoxydables) la microstructure est planaire et ne comporte pas de parois (fig. 3). Des compilations des données existantes sur différents matériaux ont été effectuées par Raj et Pharr (1986) et Staker et Holt (1972).

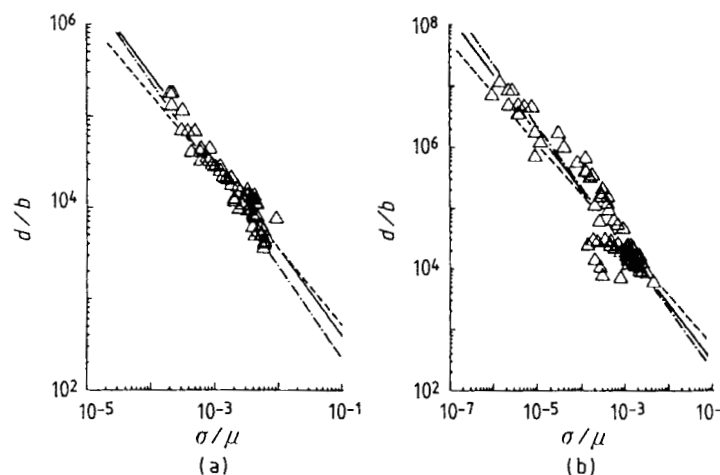


Fig. 3 : Variation de la taille des cellules de dislocations  $d/b$ , en fonction de la contrainte d'écoulement,  $\sigma$ . a) Fe et b) Al (d'après Raj et Pharr 1986).

Cette relation phénoménologique est utilisée par de nombreux auteurs dans le cadre de modèles très différents. Ainsi, la variation du champ de contrainte élastique des dislocations inversement proportionnel à la distance a été évoquée comme une explication possible pour cette relation (Gil Sevillano et Aernoudt 1987). Cela reviendrait à supposer que les dislocations sont à tout instant à l'équilibre sous l'effet des forces appliquées. Seeger (1988) a fait remarquer que ce n'est heureusement pas le cas, de sorte que la microscopie électronique permet d'observer des structures de cellules sous contrainte appliquée nulle. Cette même observation s'applique également à une autre approche, connue sous le nom de "principe de similitude" (Kuhlmann-Wilsdorf 1962) et que nous discutons plus loin (cf. § I-3).

Enfin, la combinaison des équations (1) et (2) nous donne une troisième relation, associant distance moyenne entre dislocations et dimension caractéristique de la microstructure :

$$\lambda \propto \rho^{-1/2} \quad (3)$$

La valeur du coefficient de proportionnalité entre  $\lambda$  et  $\rho^{-1/2}$  est fonction de la constante K de l'équation (2) qui n'est souvent connue que de manière imprécise.

## I-2. DURCISSEMENT DES CRISTAUX CFC EN SOLLICITATION UNIAXIALE

Nous présentons ici une brève revue des différentes formes d'organisation des dislocations dans un monocristal CFC en mode de sollicitation uniaxiale. Bien qu'il existe une grande diversité de microstructures en fonction des conditions de sollicitation, l'influence respective des différents paramètres expérimentaux peut être analysée à partir des nombreux essais mécaniques et analyses microstructurales publiés dans la littérature (pour des articles de revue cf. Mughrabi 1975, Louchet et Bréchet 1988, Basinski 1979, Hirsch 1975, *Éléments de Métallurgie Physique* Vol. 5 1991 ).

Parmi les mécanismes classiques discutés dans la littérature, on trouve la montée des dislocations coin, que nous laisserons de côté dans la suite de ce travail, et le glissement dévié des vis. Ce dernier dépend de la largeur de dissociation, elle même contrôlée par l'énergie de faute d'empilement (EDE) du matériau considéré. L'intersection de deux dislocations non coplanaires produit des crans dont l'influence se fait surtout sentir à basse température. La formation de jonctions entre dislocations est à l'origine des points d'accumulation de dislocations immobiles dans la microstructure et gouverne, pour l'essentiel, la contrainte d'écoulement plastique en glissement multiple. Enfin, le champ de contraintes internes peut également s'opposer au glissement des dislocations. Expérimentalement, ces propriétés sont difficiles à mettre en évidence et on ne sait

toujours pas bien définir le champ de contraintes internes moyen (c'est à dire macroscopique) associé à une microstructure donnée.

Les conditions de sollicitation comme la température (T) et la vitesse de déformation ( $\dot{\gamma}$ ) jouent également un rôle essentiel, via les phénomènes d'activation thermique. Les approches phénoménologiques, telle celle proposée par Hart (1970), les considèrent comme étant des variables d'état de la plasticité. Le cas de la déformation est plus ambigu car cette quantité n'est pas une variable d'état. C'est la faiblesse des approches phénoménologiques qui pour définir la "structure" font appel à des variables internes dont la définition à l'aide de paramètres microscopiques n'est pas connue. Dans notre cas, il paraît clair que de telles variables sont nécessairement liées aux populations de défauts.

### A. Effet de la vitesse de déformation et de la température

Par analogie avec les diagrammes d'Ashby, on peut mettre en évidence quatre domaines dans un diagramme contrainte d'écoulement-température à vitesse de déformation constante, (cf. fig. 4 d'après Philibert 1979) :

I) Un domaine thermiquement activé à basse température et faible ou moyenne vitesse de déformation.

II) Un domaine athermique ou peu activé (plateau), correspondant aux températures moyennes et aux vitesses de déformation usuelles ( $\approx 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ ). Dans le cas des métaux CFC, cette région a fait l'objet de nombreuses observations.

III) Un domaine thermiquement activé de haute température où le glissement dévié est abondant et la montée très active.

IV) Un domaine de fortes contraintes (au-delà de la contrainte maximale au zéro absolu) et grandes vitesses de déformation, encore appelé domaine visqueux, où toutes les dislocations sont mobiles. La déformation plastique peut alors être décrite par les équations de mouvement d'une dislocation isolée (Louchet et Bréchet 1988).

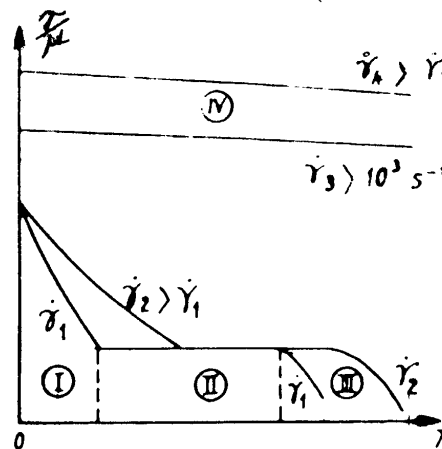
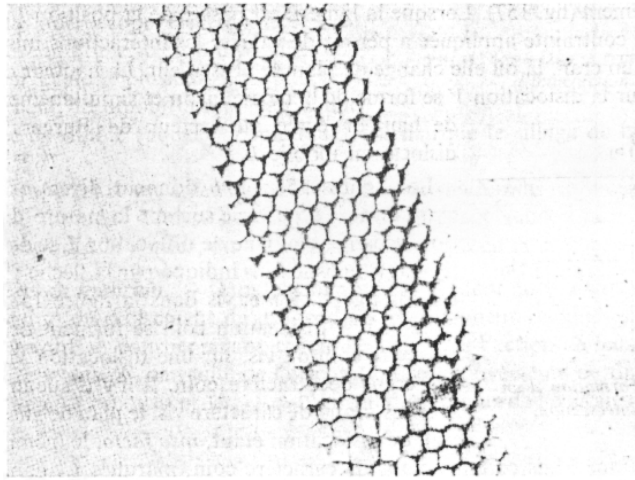
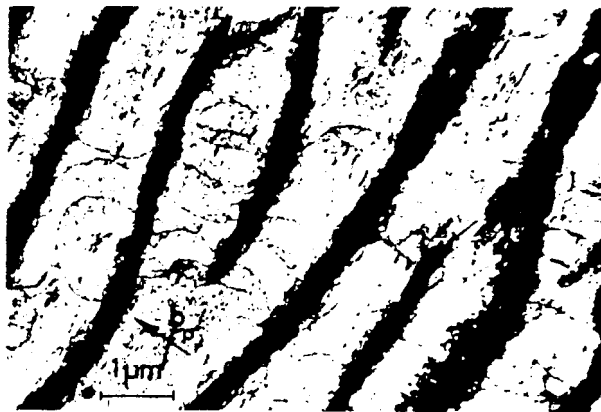


Fig. 4 : Variation de la contrainte d'écoulement en fonction de la température à vitesse de déformation constante. (Philibert 1979)

En règle générale, une élévation de la température ou une diminution de la vitesse de déformation activent de nouveaux mécanismes et fournissent aux dislocations des degrés de liberté supplémentaires. En allant des basses vers les hautes températures, on rencontre donc des structures de mieux en mieux organisées et très certainement auto-écrantées (cf. fig. 5). De même, en fatigue, le mouvement alterné des dislocations constitue un degré de liberté supplémentaire car il favorise la formation de configurations stables vis-à-vis des deux sens de la contrainte appliquée. La formation de ces structures est favorisée par l'absence de forces de friction de réseau qui, lorsqu'elles sont prédominantes, conduisent à un effacement des effets collectifs.



*Fig. 5 : Sous-joint de torsion dans le fer après fluage (x48 000). D'après Dadian et Talbot-Besnard.*



*Fig. 6 : Microstructure des dislocations dans un monocristal de cuivre sollicité en fatigue. Section parallèle au plan de glissement primaire (111) à l'intérieur d'une Bande de Glissement Persistante (Mughrabi 1988) .*

Holt (1970) a fait remarquer qu'il est certainement plus simple, pour nombre de raisons, d'étudier les microstructures obtenues en régime permanent. On connaît en plasticité deux situations où l'existence d'un régime permanent est établi, le fluage secondaire, avec sa microstructure caractéristique en cellules, et la fatigue des métaux CFC

dans les conditions où se forment les Bandes de Glissement Persistantes (ou BGP, cf. fig. 6). La formation des BGP est un cas privilégié car il met en jeu une organisation très régulière avec un seul vecteur de Burgers actif, et une forte densité de murs multipolaires de type coin qui constituent des structures bien auto-écrantées. C'est la raison pour laquelle nombre de modèles récents se sont attachés à reproduire les microstructures de fatigue (cf. § I-3).

## B. Stades de déformation

Aux températures basses et moyennes, les courbes de consolidation des monocristaux CFC présentent trois stades successifs (fig. 7). Chacun d'eux correspond à des mécanismes de déformation différents et à des microstructures caractéristiques (Eléments de métallurgie Physique Vol. 5 1991).

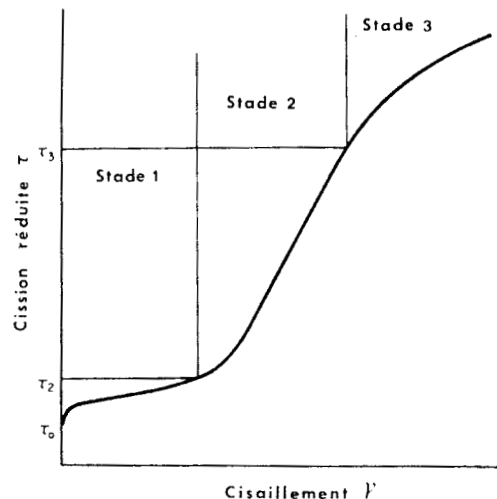


Fig. 7 : Courbe de consolidation d'un monocristal CFC. Définition des trois stades de la déformation.

### *Le stade I (glissement facile)*

Ce stade, qui dépend peu de la température, est observé dès le début de la déformation plastique dans les monocristaux orientés pour le glissement simple. Il est caractérisé par un très faible taux de durcissement,  $\theta_I = d\sigma/d\varepsilon$ , constant et de l'ordre de  $\mu/3000$ . Ce stade est d'autant plus développé que l'orientation initiale de sollicitation s'éloigne de l'axe de zone  $\langle 001 \rangle \langle 111 \rangle$ . Il se termine avec l'apparition de dislocations du système secondaire.

Les études microstructurales montrent que : - La déformation se localise principalement sur le plan de glissement primaire avec des distances de glissement grandes, parfois de l'ordre du diamètre de l'échantillon. Le nombre de dislocations par bande de glissement atteint 20 à 30 dislocations en fin de stade I. - La polygonisation

(alignement des dislocations perpendiculairement aux plans de glissement) se produit, mais surtout au niveau des pliages. - Certaines dislocations sont immobilisées par des sous-joints, formant ainsi des régions de forte densité. - La densité des dislocations primaires reste largement supérieure à la densité des autres systèmes. La courbure d'une dislocation isolée est équilibrée par la seule contrainte appliquée, ce qui suggère l'absence de contraintes internes (Mughrabi 1975). Dans les régions de plus grande densité, on observe des veines ou des murs dipolaires de caractère coin, n'induisant que de très faibles désorientations.

La déformation au cours du stade I est surtout caractérisée par les interactions élastiques entre dislocations de vecteurs de Burgers opposés, se déplaçant dans des plans de glissement parallèles (fig. 8). Il en résulte soit la formation de configurations multipolaires pour les coins, soit l'annihilation des vis par glissement dévié si la distance entre plans est inférieure à une valeur critique. Compte-tenu de leur libre parcours moyen important, un grand nombre de dislocations émises par les sources atteignent la surface du cristal, favorisant une sensibilité importante de ce stade à la dimension de l'éprouvette et aux états de surface (Mott 1952, Garstone, Honeycombe et Greetham 1956).

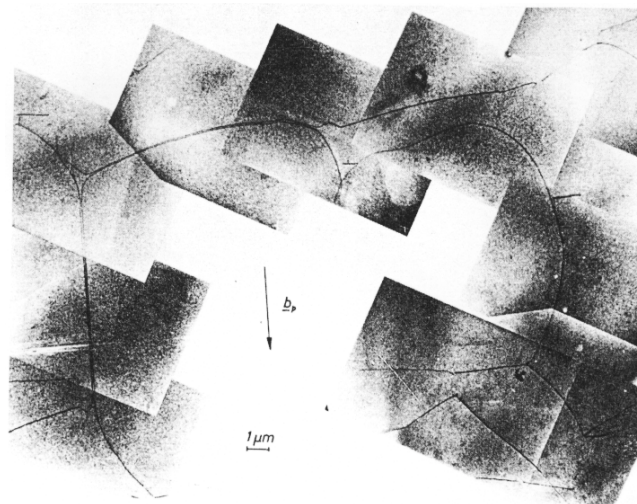


Fig. 8 : Exemple de microstructure observée dans un monocristal de cuivre en stade I. Section (111) parallèle au plan de glissement primaire, état sous contrainte  $\tau=0.11\text{MPa}$  à  $T=78\text{K}$  (Mughrabi 1975).

### **Le stade II (durcissement linéaire)**

Lorsque la déformation augmente, la rotation du cristal induite par le glissement facile tend à favoriser l'activation de nouveaux systèmes de glissement. Cependant ceux-ci ne peuvent se propager sur de longues distances car ils rencontrent une forte densité d'obstacles primaires. Ce sont donc surtout les effets de relaxation des contraintes locales qui causent l'activation du système secondaire. L'interaction de ce système avec les dislocations primaires conduit à la formation de divers types de produits de réaction, dont les verrous de Lomer-Cottrell. Le taux de durcissement,  $\theta_{II}$ , est toujours constant mais

beaucoup plus élevé qu'au stade I. Sa valeur moyenne est voisine de  $\mu/300$  et elle est relativement indépendante de la température et de l'orientation du cristal (Basinski 1975).

La sous-structure de dislocations associée au stade II a été analysée en microscopie électronique en transmission (MET) pour divers métaux CFC, en particulier le cuivre. Elle présente toujours les mêmes caractéristiques d'un métal à un autre. On distingue deux types de régions contenant des configurations différentes: les premières sont constituées d'une faible densité de dipôles coins primaires, associée à des dislocations secondaires. On n'observe pas de désorientation cristallographique dans ces régions. Les secondes sont constituées de bandes alternativement désorientées dans un sens et dans l'autre, bordées de parois complexes et denses de dislocations (fig. 9), dont une fraction importante est constituée de verrous de Lomer-Cottrell. Ces parois sont approximativement parallèles aux plans de glissement primaires et leurs distances respectives sont inversement proportionnelles à la contrainte appliquée.

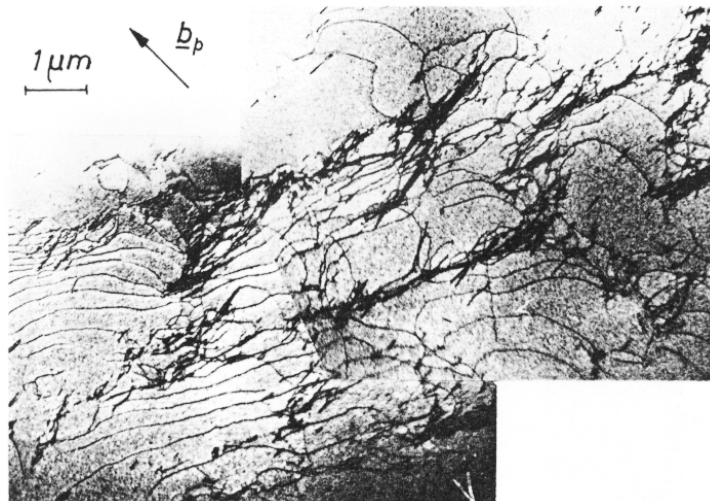


Fig. 9 : Exemple de microstructure observée dans un monocristal de cuivre en stade II. Section (111) parallèle au plan de glissement primaire, état sous contrainte  $\tau = 1.2$  MPa à  $T = 78\text{K}$ . (Mughrabi 1975)

A toutes les températures, les mesures montrent que les densités de dislocations primaires et secondaires sont comparables. Cependant, la majeure partie de la déformation est toujours fournie par l'activité du système primaire.

Le fort taux de durcissement rencontré au stade II a fait l'objet de nombreuses discussions dans le passé. Seeger (1955) supposait l'existence d'empilements de dislocations devant les barrières de Lomer-Cottrell, mais ce modèle est aujourd'hui abandonné, faute de confirmation expérimentale. Le modèle de la forêt que nous avons mentionné plus haut (Friedel 1964, Saada 1961) semble aujourd'hui universellement adopté, sous une forme ou sous une autre (Kocks 1966). Dans le détail, une modélisation complète se heurte à une difficulté majeure. Du fait de l'hétérogénéité de la

microstructure, il n'est pas aisé de définir une distance moyenne entre obstacles de la forêt. En parallèle, la contrainte interne commence à varier dans l'espace de manière significative.

Le taux de durcissement important au cours de ce stade conduit rapidement la contrainte d'écoulement vers des valeurs proches de la contrainte d'activation du glissement dévié. Cette limite marque la fin du stade II et apparaît d'autant plus tôt que l'EDE du matériau considéré est élevée. C'est le cas, par exemple pour l'aluminium à la température ambiante, pour lequel le stade II se réduit à un simple point d'inflexion entre stades I et III.

### *Stade III et glissement multiple : durcissement "parabolique"*

Le stade III est caractérisé par un taux de durcissement décroissant continuellement avec la contrainte d'écoulement. Dans les essais de traction uniaxiaux, il s'étend jusqu'à la striction des éprouvettes, mais dans des essais plus complexes on peut mettre en évidence des stades ultérieurs (stade IV) dont la nature est encore mal comprise (Rollett et Kocks 1993). La contrainte de début de stade III,  $\tau_{III}$  décroît fortement lorsque la température augmente. De nombreux auteurs ont mesuré cette dépendance et observé qu'elle décroît exponentiellement avec la température :

$$\ln(\tau_{III} / \mu) = \ln(\tau_{III}(0) / \mu(0)) - BT \quad (4)$$

où  $\tau_{III}(0)$  et  $\mu(0)$  sont respectivement les valeurs de  $\tau_{III}$  et du module de cisaillement à 0 K et B une constante.

L'analyse des traces de glissement confirme l'existence de déviations abondantes des dislocations au cours de ce stade. Les études en MET sont rendues difficiles par les fortes densités de dislocations. Toutefois, il est admis que le glissement dévié favorise une relaxation des contraintes internes et réduit par là même le taux de durcissement du matériau. Ce degré de liberté supplémentaire permet une réorganisation locale et favorise la formation d'une microstructure tridimensionnelle sous forme de cellules de dislocations. L'apparition de cette structure cellulaire caractéristique est effectivement toujours favorisée par les hautes températures et les fortes énergies de faute, ce qui permet de rationaliser les différences de comportement entre le cuivre et l'aluminium. L'étude du  $\tau_{III}$  constitue donc un bon test pour les modèles du glissement dévié (Escaig 1968, Bonneville 1985).

Dans le cas de monocristaux initialement orientés suivant des axes de haute symétrie favorisant le glissement multiple, les courbes de déformation prennent également une allure parabolique (fig. 10). Plus précisément, après un transitoire de l'ordre du pourcent,



le taux de déformation décroît linéairement avec la contrainte (cf. Franciosi et Zaoui 1982, Neuhaus et Schwink 1992 pour les études les plus récentes). Une structure cellulaire est formée dès la fin du transitoire (cf. fig. 11) avec une dimension caractéristique qui décroît comme l'inverse de la contrainte d'écoulement.

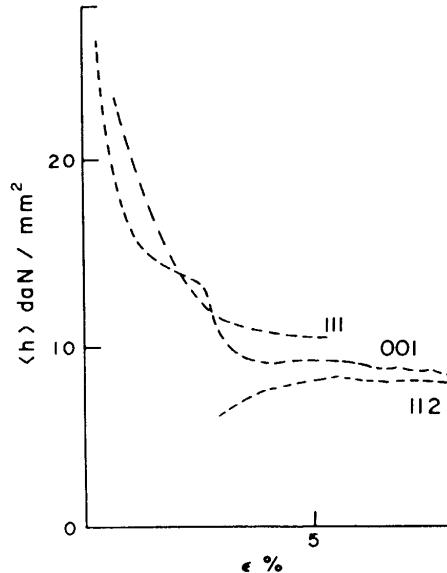


Fig. 10 : Variation du taux de durcissement en fonction de la déformation pour trois directions de traction,  $\langle 112 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 001 \rangle$ . D'après Franciosi et Zaoui 1982.

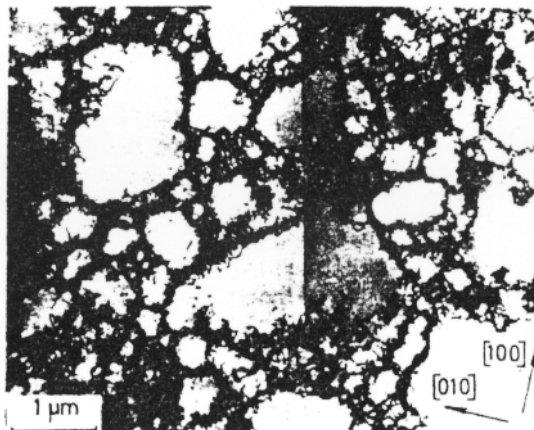


Fig. 11 : Microstructure cellulaire en glissement multiple. Monocristal de cuivre [001] déformé en traction à la température ambiante (Mughrabi 1988).

Comme plusieurs systèmes de dislocations interagissent avec des activités comparables, le glissement dévié peut intervenir dès les faibles déformations en raison des fortes contraintes locales. Ce type de situation est important dans la pratique car il reproduit lors d'essais sur des monocristaux des conditions proches de celles d'un grain dans un polycristal. C'est sans doute la raison pour laquelle de nombreux modèles phénoménologiques ont été proposés, tel celui de Kocks (1976), qui attribuent l'affaiblissement du taux de durcissement à des mécanismes de restauration dynamique.

En revanche, il n'existe pratiquement pas de modèles réellement basés sur des mécanismes de défauts en ce domaine.

En résumé pour cette partie, la théorie des dislocations permet de rendre compte, au moins de manière qualitative, des phénomènes qui interviennent successivement au cours de la déformation plastique des cristaux CFC. L'organisation des dislocations est fortement influencée, à la fois par les caractéristiques des matériaux (systèmes de glissement actifs, énergie de faute d'empilement, ...) et par des paramètres extérieurs (température, vitesse de déformation, contrainte d'écoulement ...). Les microstructures formées peuvent être interprétées comme le produit d'une compétition entre mécanismes de production des dislocations mobiles d'une part et mécanismes de blocage et de réarrangement d'autre part. Toutefois, le lien entre ces mécanismes élémentaires et l'organisation de la microstructure d'une part et le durcissement d'écrouissage d'autre part reste encore mal compris. L'étude de ces phénomènes collectifs a fait l'objet d'un certain nombre d'approches théoriques que nous décrivons maintenant.

### I-3. MODÈLES D'ORGANISATION DES DISLOCATIONS

Les études expérimentales sur mono- ou polycristaux montrent que la déformation plastique est fortement hétérogène, dès le début de la déformation. Elle est, à tout instant, confinée dans une petite fraction (quelques %) du volume total des échantillons, appelée "volume actif" (Schwink 1966). La dimension de ce volume actif, sa distribution spatiale, sa relation avec l'état plastique initial, avec les conditions de sollicitations et son évolution tout au long de la déformation ne peuvent être prédits par la théorie. De nombreux modèles supposent donc la déformation plastique homogène et assimilent la vitesse de déformation locale à la vitesse de déformation moyenne. Ils identifient ainsi deux quantités qui diffèrent, au moins aux faibles déformations, d'un ou deux ordres de grandeur.

L'énergie élastique totale d'un cristal est abaissée lorsque les dislocations s'organisent en structures auto-écrantées. C'est pourquoi une microstructure régulière se forme si la mobilité des dislocations ou le jeu des mécanismes de création et de destruction le permet. A la question "comment cette microstructure se forme-t-elle ?", il n'existe pas de réponse unique. La plupart des modèles existants se contentent de décrire des configurations observées ou hypothétiques et d'en tirer des conséquences. Deux approches théoriques peuvent cependant être dégagées de la littérature. Selon la première, la cinétique des mécanismes d'organisation est prépondérante et répond à des critères de minimisation de l'énergie élastique par unité de longueur. La seconde approche est

cinématique ou dynamique et explique la formation d'une structure hétérogène comme le résultat de l'instabilité d'une structure uniforme vis-à-vis de fluctuations de densité. Nous procédons maintenant à une brève revue des principaux modèles dérivés de telles approches.

### A. Le modèle de Taylor

Ce modèle ne discute pas à proprement parler de l'organisation des dislocations. Bien au contraire, il montre que le comportement générique de la consolidation au cours de la déformation plastique peut être retrouvé à l'aide d'une hypothèse simple de distribution des dislocations sur un réseau régulier. Taylor (1934) explique l'origine de la consolidation plastique à l'aide des interactions élastiques entre dislocations situées sur différents plans de glissement. Deux dislocations coins de signes opposés, parallèles et infinies ne peuvent se croiser et s'immobilisent lorsque la cission,  $\tau$ , est inférieure à la valeur critique  $\mu b / [8\pi h(1-\nu)]$ , où,  $h$ , est la distance entre plans de glissement. Au cours de la déformation, la densité totale est supposée constituée de  $N$  dislocations distribuées de façon homogène sur un réseau carré, de manière à s'auto-écranter parfaitement (fig. 12).

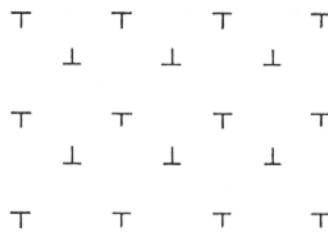


Fig. 12 : Réseau de Taylor.

Avant de s'immobiliser, chaque dislocation a parcouru, une distance moyenne  $L$ , produisant une déformation,  $\epsilon = NbL$ . La distance moyenne entre plans de glissement est donc  $h \approx N^{-1/2}$ . La contrainte s'opposant au déplacement des dislocations est de la forme  $\tau \approx [\mu b / 8\pi(1-\nu)]N^{1/2}$ . Si l'on suppose que cette contrainte est exactement celle qui s'oppose à la contrainte appliquée, on trouve une relation parabolique simple reliant la contrainte d'écoulement critique,  $\tau_c$ , à la déformation,  $\epsilon$  :

$$\tau_c \approx [\mu / 8\pi(1-\nu)](\epsilon b / L)^{1/2} \quad (5)$$

Ce modèle permet de retrouver le comportement parabolique des courbes contrainte-déformation observées sous certaines conditions de sollicitation. Il faut remarquer cependant que, dans des conditions de glissement facile auxquelles ce modèle

se rapproche, on s'attendrait plutôt à trouver un durcissement caractéristique du stade I. Ainsi, cet exemple permet de mettre en évidence certaines insuffisances des modèles théoriques à deux dimensions intrinsèquement liées à la dimensionnalité choisie (cf. chapitre IV et V).

## **B. Modèles énergétiques et approches "thermodynamiques"**

Un certain nombre d'arrangements stables, en général formés à haute température (au delà de  $0,5 T_f$ , ou  $T_f$  est la température de fusion) peuvent être décrits par un critère de minimisation d'énergie. Le réseau de Frank et les structures de polygonisation se forment dans des conditions où le glissement dévié et la montée sont faciles. Les dislocations ont alors la possibilité et le temps d'évoluer vers des configurations qui minimisent l'énergie élastique stockée dans le cristal. En toute rigueur, la densité de dislocations devrait être nulle à l'équilibre thermodynamique. En pratique, la formation de structures métastables est inévitable lors de la croissance cristalline ou d'un recuit à haute température. La présence de dislocations est alors nécessaire pour accommoder :

- une différence d'orientation qui ne peut se résorber entre deux zones du cristal (sous-joints, joints de grains de faible désorientation)
- les gradients thermiques ou de concentration inhérents à la croissance cristalline,
- les différences de paramètre cristallin à une limite de phase (croissance épitaxiale, précipitation semi-cohérente).

Les modèles de type LEDS (Low Energy Dislocation Structures) proposés par Kuhlmann-Wilsdorf et décrits en détails par Hansen et Kuhlmann-Wilsdorf (1986), semblent s'appliquer à de telles situations.

Ce type de modèle traite, en pratique, de microstructures de dislocations parfaitement auto-écrantées. Deux règles élémentaires suffisent alors à décrire l'organisation spatiale des dislocations. La première suppose que la contrainte effective sur chaque dislocation ne peut excéder la contrainte de friction. Cette hypothèse revient à supposer qu'au cours de la déformation le système suit un chemin d'équilibre quasi-statique. Une seconde hypothèse est nécessaire pour déterminer le type de microstructure formée. Parmi différentes configurations possibles on postule que la microstructure observée expérimentalement est celle qui minimise l'énergie élastique par unité de longueur de dislocation. Bien évidemment, la minimisation par unité de longueur permet d'éviter la solution triviale de densité nulle. Les microstructures discutées ici sont formées de sous-joints plans interconnectés à trois dimensions, comme les structures cellulaires observées à haute température (Gil Sevillano et Aernoudt 1987).

Bien que cette approche permette de retrouver la loi de variation des distances caractéristiques comme l'inverse de la contrainte (d'où son nom de "principe de similitude"), son domaine d'application prête à discussion (Kuhlmann-Wilsdorf 1992, Kubin 1992). En effet, dans de nombreux cas, les hypothèses utilisées ne tiennent pas compte de la nature intrinsèque de la déformation plastique : une évolution quasi-statique est par définition réversible, alors que la déformation plastique est toujours irréversible. Le mouvement des dislocations produit de la chaleur et environ 80-90% du travail mécanique est dissipé (Seeger et Frank 1988). Dans ces conditions, on est en présence d'un système thermodynamique ouvert et dissipatif, maintenu loin de l'équilibre.

### C. Le Modèle de Holt et l'analyse de stabilité linéaire

Le modèle proposé par Holt (1970) repose sur une analogie avec le modèle de décomposition d'une solution solide sursaturée développé par Cahn (1961). Précisons d'abord que ce modèle s'applique à une distribution homogène de dislocations vis parallèles, de longueur infinie, et comportant les deux signes en densités égales. L'analyse peut ainsi être ramenée à deux dimensions. Il n'y a pas de contrainte appliquée et la densité totale,  $\rho$ , reste constante, en l'absence d'annihilation et de multiplication. La force motrice dérive du gradient de l'énergie élastique totale du système, c'est-à-dire, en fait, de l'énergie d'interaction. Afin de calculer celle-ci, Holt introduit une fonction de corrélation de paires empirique  $F(r, \rho)$ , bien que la distribution initiale soit supposée aléatoire. La forme de cette fonction de distribution est basée sur deux hypothèses. Il existe un rayon de coupure  $r_c$  pour les interactions à longue distance et ce rayon de coupure est proportionnel à  $\rho^{-1/2}$ , distance moyenne entre premiers voisins. Avec ces hypothèses, Holt calcule un "potentiel chimique" dont le gradient détermine la mobilité des dislocations. La réponse du système est alors testée vis-à-vis d'une fluctuation spatiale périodique de la densité. Presque toutes les fluctuations conduisent à un comportement instable, puisque réduisant l'énergie totale d'interaction. L'une d'entre elles croît plus vite que les autres en amplitude et prédomine. Sa longueur d'onde,  $\lambda_m$ , est telle que,  $\lambda_m \sim 2,5 r_c \propto \rho^{-1/2} \propto 1/\sigma$ , conformément au "principe de similitude" (cf. équation 2). Ce traitement, dont l'originalité est d'introduire l'analyse de stabilité linéaire en théorie des dislocations, montre l'existence d'une instabilité préférentielle mais ne permet pas de prédire la solution aux temps longs.

Pendant longtemps le modèle de Holt a été considéré comme expliquant la formation des structures cellulaires. On comprend mieux maintenant toutes ses insuffisances. En l'absence d'une contrainte extérieure et d'événements de création et d'annihilation, le système étudié est un système isolé. Il est donc justifié de le traiter par la thermodynamique de l'équilibre. En revanche, la solution obtenue ne peut être extrapolée

à des problèmes de plasticité. En effet, l'existence d'un potentiel chimique et d'une mobilité constante des dislocations restent à prouver pour un système porté loin de l'équilibre (Goriatchev 1993). Enfin, l'hypothèse d'une fonction de corrélation et celle d'un rayon de coupure constant associés à la distribution initiale aléatoire sont difficilement acceptables. La solution prédite par le modèle reste cependant surprenante, à supposer qu'elle soit exacte. Il n'est pas intuitif qu'une distribution aléatoire de dislocations vis soit toujours instable et s'organise spontanément en une structure périodique (cf. Chapitre IV).

#### D. Le modèle statistique de Kocks

Il s'agit avant tout d'un modèle permettant d'expliquer la contrainte d'écoulement lorsque celle-ci est contrôlée par les interactions entre dislocations glissiles et la forêt au cours du stade II. Kocks (1966) ne recherche pas d'explication globale pour la formation d'une microstructure, mais l'interprète comme le résultat inéluctable d'une succession d'événements. Les dislocations de la forêt sont supposées distribuées dans l'espace de manière aléatoire. Lorsqu'une ligne de dislocation franchit ces obstacles, elle rencontre deux types de situations (fig. 13). - Certaines zones "dures", autour desquelles la dislocation mobile laisse des "débris" ou boucles d'Orowan irrégulières après son passage, sont contournées (Kocks 1985, Gil Sevillano *et al.* 1991). - Inversement d'autres régions sont pénétrables par la ligne de dislocation et constituent des chemins de déformation privilégiés. Kocks assimile les obstacles impénétrables aux jonctions sessiles obtenues par réaction entre la ligne mobile et les arbres de la forêt.

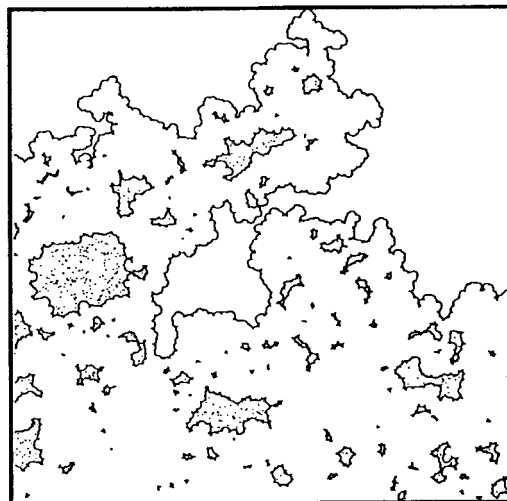


Fig. 13 : Forme critique d'une ligne de dislocation après déplacement de bas en haut à travers une forêt d'obstacles ponctuels infiniment durs. Noter la présence de débris laissés autour des zones impénétrables (Jiménez 1982).

Au cours du temps, la déformation reste concentrée dans les "canaux" d'écoulement facile, laissant de plus en plus de débris autour des régions infranchissables. C'est là l'origine du durcissement selon Kocks et on note qu'il n'est pas dû, comme dans le modèle de la forêt, à l'augmentation de la densité intersectée mais à l'accumulation de configurations sessiles dans le plan de glissement. Ces dernières croissent et suscitent l'activation de systèmes secondaires pour former finalement un squelette tridimensionnel à l'origine de la structure cellulaire. Le principe de similitude est retrouvé de la manière suivante: à l'aide de l'équation phénoménologique (1) reliant,  $\sigma_c$  et  $\rho^{1/2}$ , la contrainte d'écoulement est reliée à la distance moyenne entre arbres de la forêt. La dimension,  $\lambda$ , des cellules est associée à la distance moyenne entre zones infranchissables et cette dernière est empiriquement trouvée proportionnelle à  $\rho^{-1/2}$ . Il en résulte que  $\sigma \propto 1/\lambda$  (cf. équation 2).

L'originalité essentielle de ce modèle réside en ce que la taille des cellules et la contrainte d'écoulement ne sont pas reliées directement mais indirectement, chacune dépendant de la distance moyenne entre obstacles. Par contre, il est aisé de souligner certains défauts du modèle (Hirsch 1975) : en stade II les dislocations de la forêt ne sont pas distribuées de manière aléatoire, et il semble difficile d'expliquer la formation de structures cellulaires sans faire intervenir le glissement dévié. A cela, on peut ajouter que les jonctions ne sont pas des obstacles infiniment forts, de sorte que la formation des débris est moins fréquente que supposée par Kocks. Au surplus, les boucles ainsi formées ont une tendance naturelle à s'éliminer spontanément sous l'effet de leur self-interaction (Devincre et Kubin 1993).

## E. Modèles de réaction-diffusion et dérivés

Ces modèles sont récents et illustrent l'application des méthodes de dynamique non linéaire à la théorie des dislocations. Ils établissent une analogie entre la formation de microstructures organisées et certaines classes de réactions chimiques couplées (horloges chimiques). Ils imposent nécessairement des simplifications quant au nombre de vecteurs de Burgers actifs (un seul) et de populations distinctes considérées (une ou deux). L'objet étudié, la densité de dislocations, est traitée sous forme d'une fonction continue. L'évolution spatiale et temporelle de cette fonction dépend de deux mécanismes :

- Les interactions entre dislocations à courte distance, sont assimilées à des termes de cinétique réactionnelle.

- Le mécanisme de glissement des dislocations sur de longues distances est supposé équivalent à un processus diffusionnel.

Cette dernière hypothèse est souvent désignée comme étant la principale faiblesse de cette approche.

Walgraef, Aifantis et Schiller (1985, 1986, 1988) ont été les premiers à examiner l'organisation d'une structure dipolaire en sollicitation cyclique dans les CFC. Le caractère diffusif des dipôles est ici justifié à l'aide d'un développement en série de Taylor de l'énergie d'interaction. Cette analyse revient, en fait, à supposer un écrantage parfait de la structure. En écrivant les équations bilan du système, qui assurent la conservation des espèces en présence (densité de mobiles et de dipôles), on obtient un système d'équations couplées aux dérivées partielles. Chacune de ces équations est de la forme :

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} - D_i \Delta \rho_i = g_i(\rho_i, \rho_j, \sigma), \quad (5)$$

où  $D_i$  est le coefficient de diffusion associé à l'espèce  $i$  et  $g_i$  une fonction non linéaire intégrant les mécanismes réactionnels (création, annihilation et couplage). La résolution de ces équations fait appel à des méthodes d'analyse non linéaire classique et conduit, grâce à un choix judicieux des fonctions  $g_i$ , à la détermination de structures caractéristiques (veines, murs, Bandes de Glissement Persistantes) en accord qualitatif avec l'expérience. L'apport principal de ce modèle est de montrer que certaines équations différentielles non linéaires peuvent présenter des solutions proches des microstructures observées. En revanche, l'analogie repose sur des hypothèses de calcul que l'on peut considérer comme peu convaincantes.

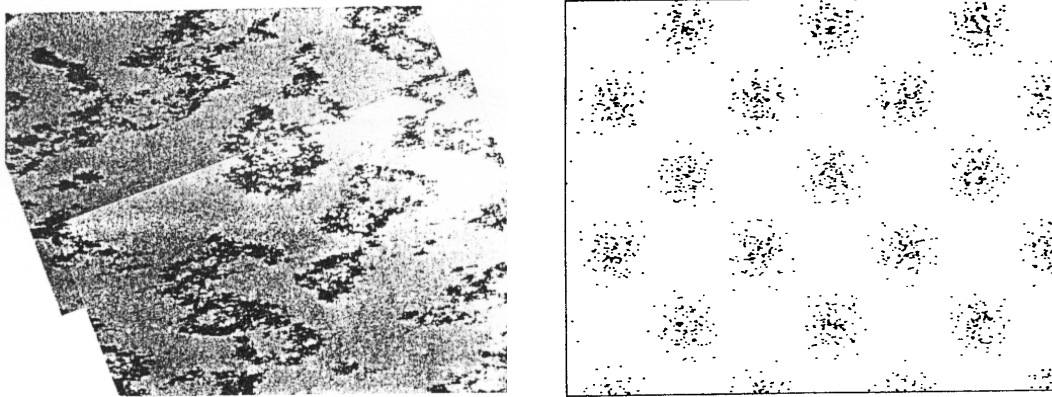


Fig. 14 : Microstructure de dislocations dans Fe-Si vue selon une section perpendiculaire au plan de glissement et à la direction de glissement primaire. a) Observation en MET, b) simulation par le modèle de Kratochvil (1991).

Kratochvil *et al.* (1988, 1991, 1992, 1993) ont depuis repris de façon plus détaillée l'étude de l'organisation d'une population de dipôles en sollicitation cyclique (fig. 14). Leur analyse du caractère diffusif des dislocations repose sur la description du mouvement des dipôles dans un gradient de contrainte interne (1988) ou encore du mouvement de ces dipôles en présence d'un "balayage" constant de dislocations vis de même vecteur de Burgers (1992). Bien qu'il soit basé sur une équation différentielle et non



locale dont le sens demande à être précisé, ce modèle paraît plus réaliste que le précédent car il s'appuie d'avantage sur une description fine des propriétés élémentaires des dislocations. Une forme plus générale (Franek *et al.* 1991) du modèle inclut également une définition cohérente des états de contrainte. Il faut noter, en effet, que le traitement d'une densité de dislocations par une fonction continue implique que l'on tienne compte explicitement des conditions de compatibilité des contraintes et de continuité des déformations. Cela se traduit malheureusement par une complexité accrue du système d'équations à résoudre.

Les résultats obtenus à l'aide de ces méthodes montrent la richesse potentielle du formalisme mathématique des systèmes non-linéaires appliqué à la plasticité, non seulement pour l'étude des structures de dislocation mais aussi pour l'étude de la localisation de la déformation plastique (Kubin et Estrin 1988). Cependant, il reste à prouver que les dislocations se comportent réellement comme les objets ainsi décrits. Seules des évaluations ou des simulations numériques permettront de tester la validité des hypothèses effectuées.

#### I-4. SIMULATIONS DE LA DYNAMIQUE DES DISLOCATIONS

Les échelles de temps et d'espace accessibles aux méthodes de simulations atomiques (Dynamique Moléculaire et Monte Carlo) interdisent l'étude de systèmes de dimensions linéaires supérieures à quelques nanomètres ( $10^6$  particules) et d'intervalles de temps dépassant la nanoseconde ( $10^6$  pas de simulation). C'est pourquoi, ces méthodes sont restreintes à l'étude des propriétés statiques et dynamiques d'une dislocation isolée dans le réseau cristallin (Legrand 1984, Huang 1989, Hoover et Ladd 1982). Il est cependant possible de dépasser les limites intrinsèques de ces techniques, en modifiant la nature de l'objet élémentaire sur lequel elles sont fondées. Cette transformation équivaut à oublier la nature discrète de la ligne de dislocation pour l'assimiler à une ligne de discontinuité à l'intérieur d'un continuum élastique. Il devient alors possible d'étudier les propriétés collectives de ces défauts à des échelles spatiales et temporelles adaptées au problème posé.

##### **A. Simulations de l'écoulement plastique**

Compte tenu des moyens de calcul disponibles, les premières simulations se sont attachées à étudier des configurations spatiales simples. S'inspirant du modèle de la forêt, Foreman et Makin (1966, 1967) ont proposé une simulation du mouvement d'une ligne de dislocation à travers une population d'obstacles ponctuels. Ceux-ci peuvent, à l'occasion, être supposés représenter les arbres de la forêt. La contrainte critique de franchissement

est définie en supposant que la tension de ligne  $T$ , due aux brins de dislocations ancrés de part et d'autre d'un obstacle, est constante. Une relation géométrique simple relie alors l'angle critique  $\Phi_c$  entre ces brins et la contrainte critique,  $\tau_j$  :

$$\tau_j = 2 \cos(\Phi_c) T / (bl) \quad (6)$$

La distance moyenne entre obstacles est  $l = (\rho/2)^{-1/2}$ , le facteur 2 tenant compte de ce que seuls les obstacles attractifs constituent des obstacles forts. Ces simulations ont permis de mettre en évidence l'existence de deux mécanismes distincts de franchissement des obstacles dans le plan de glissement des dislocations. Avec des obstacles "mous" ( $\Phi_c \geq 100^\circ$ ), la ligne de dislocation reste sensiblement rectiligne au cours du temps (fig. 15). Les segments individuels sont peu courbés à leur position critique, car la tension de ligne est grande devant la force des obstacles. C'est la situation décrite par le modèle du "zig-zag" de Friedel (1964). Inversement, lorsque les obstacles sont "forts" ( $\Phi_c \approx 0^\circ$ ), c'est la description faite par Kocks (1966) qui est privilégiée. La ligne de dislocation se déplace préférentiellement entre les régions de forte densité d'obstacles, laissant des îlots de dislocations autour des zones impénétrables (cf. § I-3 et fig. 13). Gil Sevillano et al (1991) ont montré que cette dernière situation est formellement identifiable à un mécanisme de percolation avec invasion.

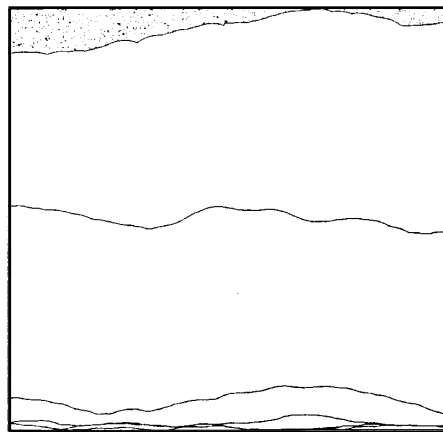


Fig. 15: Simulation de la propagation d'une ligne de glissement à travers une forêt de 9000 obstacles ponctuels. Cas des obstacles faibles ( $\phi_c=160^\circ$ ). Le cas des obstacles infiniment durs ( $\phi_c=0^\circ$ ) est représenté sur la fig. 13 (Jiménez 1982).

Il existe aujourd'hui de très nombreux travaux s'inspirant des simulations de Foreman et Makin. Parmi ceux-ci, nous ne citerons que deux exemples illustrant les faiblesses essentielles de cette description (cf. également Devincere et Kubin 1993). Tyupkina (1992) a montré que, à densité d'obstacles constante, la valeur moyenne de la contrainte d'écoulement est modifiée si on considère non plus une mais plusieurs lignes de dislocations de même signe émises par une source dans le plan de glissement. Loginov

*et al.* (1981, 1990, 1991) montrent que la contrainte critique augmente de 15 à 20% si on tient compte du champ de déformation élastique des obstacles et diminue fortement (d'environ 30%) lorsque l'on accorde à ceux-ci une certaine flexibilité. Ces deux résultats illustrent l'insuffisance de ce type d'approche. Les propriétés collectives des dislocations sont négligées car la forêt est réduite à une distribution aléatoire d'obstacles immobiles.

## **B. Simulations de microstructures à deux dimensions**

De nouvelles méthodes de simulation numérique à deux dimensions sont apparues depuis quelques années. Elles permettent d'étudier les propriétés générales d'une population de dislocations infinies et rectilignes, à la manière de Holt, c'est à dire en tenant compte des interactions élastiques à longue distance. Deux techniques différentes ont été employées; elles s'inspirent soit de la dynamique moléculaire, soit des automates cellulaires tels qu'ils sont actuellement utilisés pour l'étude dynamique des gaz sur réseau (d'Humières et Lallemand 1986). Cependant, il n'existe pas de différence fondamentale entre ces deux approches. Dans les deux cas, la force exercée sur chaque dislocation est calculée, puis les équations discrétisées du mouvement sont intégrées. Un point délicat consiste à tenir compte de l'aspect non local de la contrainte interne à l'intérieur de l'aire simulée. La solution choisie par Ghoniem et Amodeo (1988) consiste à calculer la totalité des interactions de paires indépendamment de la distance entre dislocations. Cela conduit à restreindre la simulation à l'étude de systèmes de petites dimensions, afin de limiter le nombre d'interactions de paires à calculer. Gulluoglu *et al.* (1989) s'affranchissent de cette difficulté en introduisant des conditions aux limites périodiques et en sommant jusqu'à l'infini les interactions d'une dislocation et de toutes ses images. La dimension de l'aire simulée ( $1 \mu\text{m}^2$ ) est supposée suffisamment grande pour que les effets de corrélation liés à cette procédure puissent être négligés. Enfin, Lépinoux (1987), s'inspirant du modèle de Holt, a choisi d'utiliser un rayon de coupure, ce qui revient à supposer que la contribution des dislocations situées en dehors de la sphère d'interaction est totalement écrantée

Dans toutes ces simulations, la gestion des réactions à courte portée, comme la formation de jonctions ou l'annihilation de deux dislocations, est réalisée par un traitement discret au cours du temps. A chaque pas de la simulation on teste les cas de proximité de deux lignes de dislocations et leurs possibilités d'interaction. Il faut souligner ici l'avantage technique des méthodes d'automates cellulaires qui simplifient conceptuellement le traitement des mécanismes mettant en jeu une échelle plus petite que celle du réseau sous-jacent.

Trois grandes classes "d'expériences numériques" effectuées à l'aide de ces méthodes de simulation peuvent être trouvées dans la littérature.

- Ce sont d'une part des travaux traitant le problème de la restauration statique ou plus généralement de la relaxation de l'énergie élastique d'une population de dislocations. Lors de ces simulations, les mécanismes de multiplication ne sont généralement pas pris en compte mais l'annihilation est possible.

Lépinoux (1988) montre que pour ces systèmes, contrairement aux prédictions du modèle de Holt, il n'apparaît pas spontanément de structure périodique. Indépendamment du caractère vis ou coin des dislocations, la configuration finale obtenue est constituée d'un ensemble d'amas multipolaires. Ces résultats ne sont pas modifiés de manière significative si on change la densité de dislocations, la friction de réseau, ou si on applique une faible contrainte. On vérifie ainsi que la formation d'amas multipolaires correspond bien à un écrantage de la contrainte interne et à une structure métastable, piégée dans des minima locaux d'énergie (fig.16).

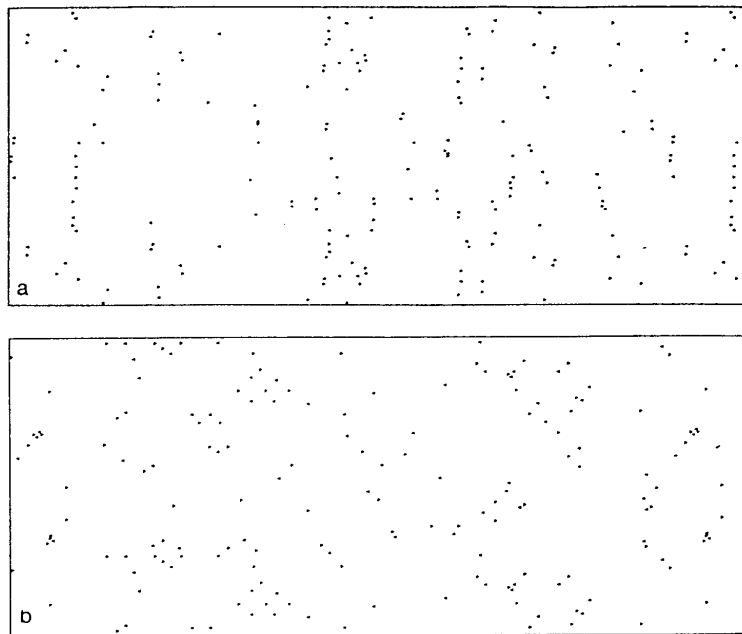


Fig. 16 : Configurations obtenues après relaxation de l'énergie élastique totale d'une même distribution initiale aléatoire, en l'absence de contrainte extérieure et de multiplication. a) Dislocations vis, b) dislocations coins (Lépinoux 1987).

- Un second groupe de travaux traite du problème de l'hétérogénéité du glissement. On regarde l'évolution d'une distribution initialement aléatoire de dislocations en présence d'une contrainte de cisaillement (Lépinoux et Kubin 1987, Kubin et Lépinoux 1988, Ghoniem et Amodeo 1990, Groma et Pawley 1993). Les mécanismes de multiplication sont modélisés par l'introduction de paires de dislocations de signes opposés dans les plans de glissement, soit de manière aléatoire, soit de manière autocatalytique. Dans ce dernier cas les dislocations fraîches sont injectées préférentiellement dans les plans actifs. De nombreux auteurs vérifient que, dans ces conditions, les dislocations vis forment spontanément des empilements de dislocations

tandis que le glissement adopte une structure "lamellaire". La figure 17 illustre le résultat obtenu pour des dislocations de type coin.

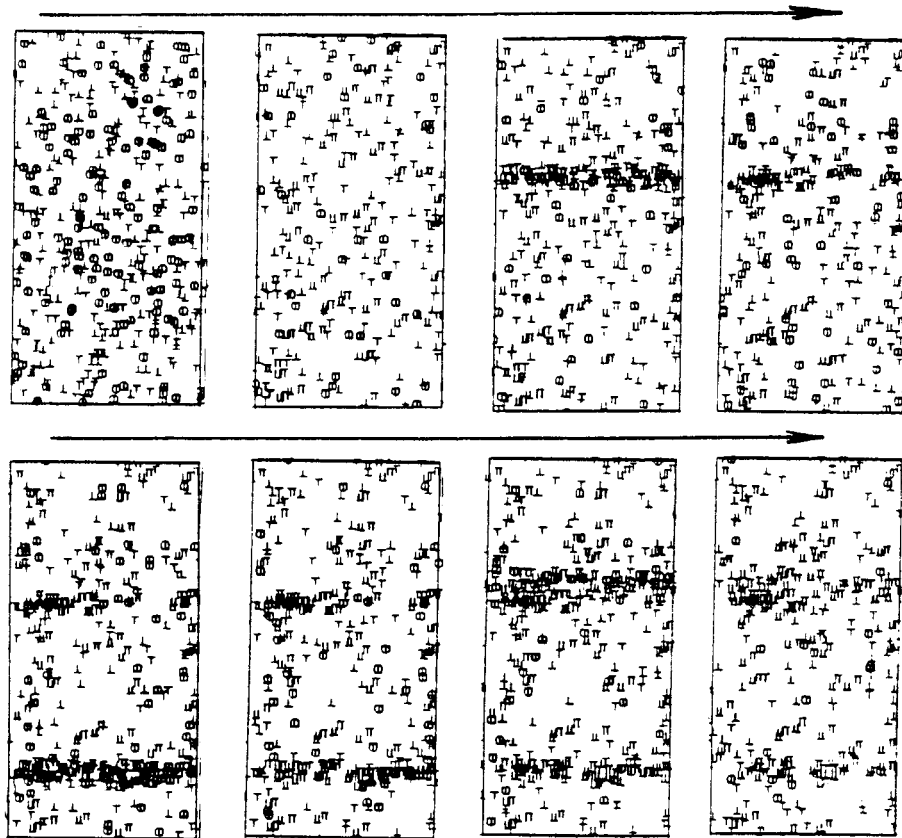


Fig. 17 : Simulation de la formation de bandes de glissement dans un ensemble de dislocations coins à deux dimensions (Ghoniem et Amodeo 1990).

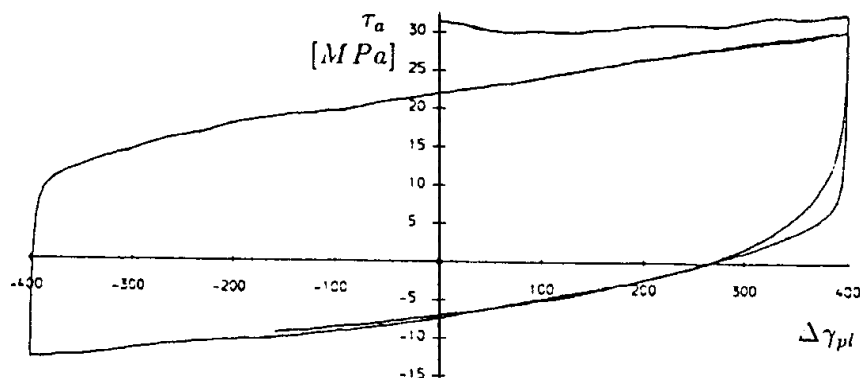


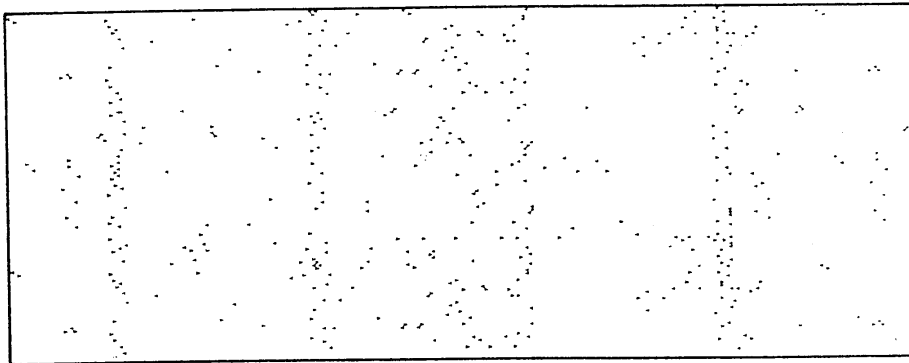
Fig. 18 : Courbe contrainte-déformation d'un système de dislocations à 2D sollicité en fatigue à vitesse de déformation constante après une prédéformation monotone. Mise en évidence de l'effet Bauschinger (Hesselbarth et Steck 1992).

Hesselbarth et Steck (1992) ont vérifié que l'état écroui obtenu lors de ces simulations du glissement simple est instable vis à vis d'une déformation ultérieure de signe opposé : c'est l'effet Bauschinger (fig. 18). Ce résultat est en accord avec les observations

expérimentales et souligne le manque de stabilité des structures de dislocation obtenues en glissement simple.

- Bien que les simulations bidimensionnelles soient par construction mieux adaptées à l'étude des problèmes dynamiques, elles ont été également utilisées pour étudier la formation des microstructures de dislocations immobiles. Dans ce cas, on met à profit l'aptitude des dislocations de type coin à se bloquer en configurations dipolaires. Sous l'aspect collectif cela conduit à la formation de parois dipolaires de faible énergie, en déformation monotone comme en fatigue (Lépinoux 1987, Amodeo 1988, Ghoniem et Amodeo 1990, Hesselbarth et Steck 1992).

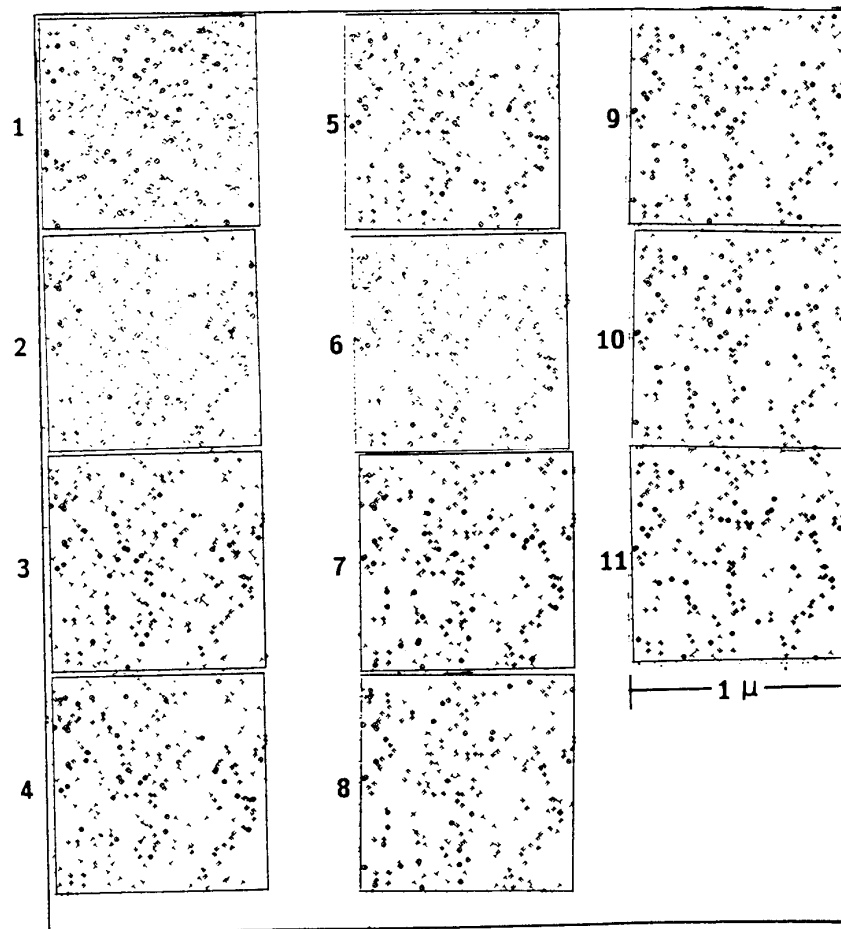
Le succès de ces simulations à reproduire la formation de parois normales à la direction de glissement, (fig. 19) doit être cependant tempéré à la lumière des observations de Gulluoglu *et al.* (1989). Ceux-ci montrent que si les interactions élastiques à longue distance sont écrantées par construction, on favorise artificiellement la formation d'une microstructure de sous-joints de signes alternés venant se placer exactement à la distance imposée par le rayon de coupure. Cela explique en substance les résultats du modèle de Holt. Pour ce qui concerne les simulations, seules les périodicités inférieures à la valeur du rayon de coupure doivent être considérées comme significatives.



*Fig. 19 : Système de dislocations coins. Une structure régulière de canaux et de parois dipolaires est obtenue après déformation à contrainte appliquée constante d'une distribution initiale aléatoire (Lépinoux 1987).*

Finalement des organisations "cellulaires" à deux dimensions ont également été reproduites (fig. 20) par Ghoniem et Amodeo (1990) et Fang *et al.* (1989). Ces microstructures sont obtenues en introduisant deux systèmes de glissement normaux au plan de la simulation. La formation de dipôles et de jonctions conduit à l'émergence d'une microstructure de type "cellulaire" (Amodeo et Ghoniem 1990).

La nature de ces résultats reste empirique et ne peut être en définitive véritablement confrontée à l'expérience. En particulier, on ignore si de telles structures obéissent au principe de similitude.



*Fig. 20 : Simulation à 2D de la formation d'une microstructure cellulaire en présence d'une contrainte appliquée de 100MPa. Les dislocations coin sont mobiles dans deux systèmes de glissement orthogonaux (Ghoniem et Amodeo 1990).*

Comme nous venons de le voir, les simulations à deux dimensions fournissent des résultats importants par leur caractère générique. Dans de nombreux cas, elles montrent l'émergence de structures de dislocations organisées à courte ou longue distance à partir de configurations initiales aléatoires. Elles soulignent ainsi une tendance générale des dislocations au cours de la déformation plastique à s'auto-organiser pour former des structures partiellement écrantées.

Cependant, ces simulations sont limitées à l'étude de situations très idéalisées. Par construction elles ne peuvent pas prendre en compte, entre autres, les effets de la tension de ligne, ni les interactions entre dislocations de différents caractères. Il est donc presque impossible de les comparer avec l'expérience. Même le glissement simple est en fait un

phénomène tridimensionnel, gouverné par le jeu des interactions entre boucles de dislocations mobiles dans des plans de glissement voisins.



# **CHAPITRE II**

## **DISCRÉTISATION DES LIGNES DE DISLOCATION**



## II. DISCRÉTISATION DES LIGNES DE DISLOCATION

L'étude des propriétés dynamiques des dislocations par simulation suppose l'existence préalable d'un modèle descriptif de l'espace et des lignes de défauts. La longueur moyenne d'un segment de dislocation étant proportionnelle à  $\rho^{-1/2}$ , où  $\rho$  est la densité, l'échelle spatiale caractéristique de ces simulations est, pour une densité moyenne de  $10^{12} \text{ m}^{-2}$  de l'ordre du micromètre. Toute description de la déformation plastique sur un domaine de dimension plus faible exclut la possibilité d'une étude des propriétés collectives des dislocations.

Dans ce chapitre, nous définissons une nouvelle méthode tri-dimensionnelle de description des dislocations, adaptée à l'étude de systèmes de taille mésoscopique. Cette étape de notre travail est cruciale, car c'est elle qui conditionne le réalisme et la faisabilité des simulations. Nous décrivons successivement les conditions de discrétisation de l'espace et du caractère des dislocations dans le cadre du modèle "coin-vis" que nous avons élaboré. Dans ce cadre, nous discutons ensuite le calcul des différentes forces s'exerçant sur un segment de dislocation, en particulier celles issues des interactions élastiques à longue distance et de la tension de ligne. Enfin, le modèle de discrétisation est validé par comparaison avec les propriétés élastiques de boucles de dislocations de forme continue.

### II-1. DISCRÉTISATION DE L'ESPACE

Théoriquement rien ne s'oppose à une modélisation des lignes de dislocations à partir de l'échelle atomique. Cependant, la mise en oeuvre de telles simulations nécessiterait la représentation d'un nombre prohibitif d'atomes. Le nombre de segments de dislocations présents dans un élément de volume micrométrique dépasse déjà plusieurs centaines, valeur déjà comparable au maximum d'objets admissibles par les techniques de simulations ordinaires.

Il semble alors naturel de privilégier une description analytique des lignes de dislocations dans un continuum élastique. On oublie l'origine atomique des défauts cristallins, pour ne représenter mathématiquement les dislocations qu'en termes de lignes de discontinuité d'un continuum élastique isotrope. Cette définition classique a été dans le passé à l'origine de la théorie élastique des dislocations (Volterra 1907, Burgers 1939). Elle permet dans certains cas une description satisfaisante des propriétés de ces défauts puisque 90% de la self-énergie est stockée dans le champ de déformation élastique à longue distance. Les 10% restants proviennent des régions anélastiques du coeur des dislocations et contrôlent les propriétés aux courtes distances.

Parmi les propriétés élémentaires des dislocations il faut donc différencier les propriétés à grande distance, qui peuvent être décrites par la théorie de l'élasticité linéaire et les propriétés à courte distance (de l'ordre de quelques vecteurs de Burgers) qui sortent du cadre de cette même théorie. La solution que nous avons utilisée pour gérer cette dualité repose sur un pavage de l'espace. Un continuum élastique est discrétisé par un réseau homothétique du vrai réseau cristallin étudié, ici le réseau CFC. A l'aide de ce réseau, on différencie géométriquement les propriétés anélastiques et élastiques des dislocations intervenant respectivement à des distances inférieures ou supérieures au paramètre de maille du réseau de simulation.

Cette représentation de l'espace a été proposée pour la première fois par Lépinoux et Kubin (1987) pour décrire une dynamique des dislocations dans un espace discret à deux dimensions. Ces auteurs ont ajusté le paramètre de leur réseau de simulation sur une quantité physique significative des propriétés anélastiques : la distance critique d'annihilation spontanée d'un dipôle constitué de deux dislocations de signe opposé,  $y_c$ . Cette distance, prédite théoriquement par Friedel (1964) et Cotterill (1977), a été mesurée expérimentalement par Essmann et Mughrabi (1979) sur des monocristaux de cuivre fortement écrouis en fatigue. Elle est par définition liée à la densité maximale de dislocations admissible dans le cristal. En dessous de cette distance deux dislocations du réseau cristallin ne peuvent coexister et s'annihilent spontanément. Pour des dislocations de caractère coin on suppose qu'à basse température et en l'absence de montée, le processus d'effondrement du dipôle est un problème purement mécanique, induit par les forces attractives entre les deux segments. La distance critique correspondante,  $y_c$ , n'est donc pas thermiquement activée en principe et elle dépend peu de la nature du matériau. Sa valeur est de l'ordre de 1.6 nm dans le cuivre (Essmann et Mughrabi 1979). Pour les dislocations vis, on définit également une distance critique d'annihilation,  $y_v$ . Cette quantité dépend étroitement de la probabilité de glissement dévié et donc de la structure de coeur des dislocations aussi bien que de la température. Sa valeur est de 50 nm dans le cuivre à la température ambiante.

On déduit de ces mesures, l'échelle de longueur élémentaire d'une simulation discrétisée. Dans les simulations 2D, cette dimension est  $y_c$  ou  $y_v$  suivant que l'on considère des vis ou des coins. En 3D, il faut prendre en compte la plus petite des deux dimensions critiques. Le paramètre,  $a$ , de la maille CFC pavant l'espace est défini de telle manière que deux plans de glissement (111) du réseau de simulation soient distants de  $2y_c$ . On a alors:

$$a = 2\sqrt{3} y_c \approx 5.54 \text{ nm.}$$

A cette condition, deux dislocations de même vecteur de Burgers ne pourront s'annihiler que si elles appartiennent à un même plan de glissement du réseau de simulation. Ainsi, un réseau tridimensionnel de  $(3000a)^3$  cellules permet de décrire un

microcristal de volume supérieur à  $(16 \mu\text{m})^3$ . Enfin, les simulations à 2D que nous présentons au Chapitre 4 sont, en fait, des coupes de la simulation en 3D et elles sont basées sur le même réseau CFC.

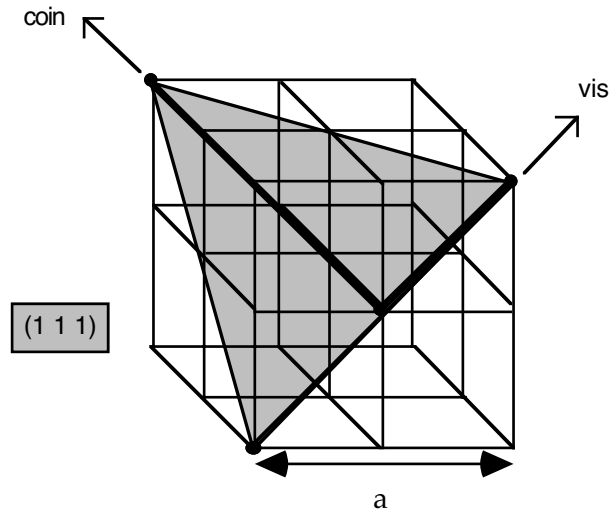


Fig. 21 : Représentation du réseau de la simulation 3D.  $a$  est le paramètre élémentaire du réseau de simulation homothétique du réseau cristallin (CFC). Les directions en trait gras définissent les directions de lignes glissiles vis et coin dans un plan de glissement (111).

Dans cette représentation, toutes les interactions de coeur ou topologiques des dislocations n'interviennent que si deux lignes de dislocations occupent simultanément un même noeud du réseau. Cette discrétisation de l'espace répond donc aux exigences dimensionnelles d'une modélisation des propriétés dynamiques des dislocations à l'échelle mésoscopique et permet une séparation nette entre propriétés élastiques et propriétés de coeur des dislocations. Dans ce qui suit, nous nous limiterons au cas d'un maillage CFC. Celui-ci est, cependant, construit à partir d'un sous-réseau cubique et la simulation peut aisément être adaptée au traitement de maillages cubiques simples, cubiques centrés ou cubiques diamant.

## II-2. DISCRÉTISATION DES LIGNES DE DISLOCATIONS : LE MODÈLE "COIN-VIS"

Les modèles proposés dans la littérature pour décrire des lignes de dislocations reposent généralement sur plusieurs hypothèses simplificatrices. Dans les cas les plus simples, ceux des modèles à 2D, les lignes de dislocations sont supposées infinies et rectilignes, ce qui permet de ramener l'expression de leur champ de contraintes à une forme analytique simple. Dans les cas bi-dimensionnels où le plan de simulation est un plan de glissement, la ligne de dislocation peut se courber et les forces de rappel qui s'opposent au déplacement sont calculées à l'aide d'une approximation de tension de

ligne constante (Cottrell 1953, Friedel 1964, de Wit et Koehler 1959). La faiblesse majeure de ces modèles est qu'ils négligent les interactions élastiques existantes entre différentes portions d'une même ligne ou avec d'autres lignes de dislocations.

En définissant le concept de self-contrainte d'une dislocation, Brown (1964) a été le premier à proposer une procédure simple qui permet de calculer la contribution des forces d'interaction à la courbure d'une ligne de dislocation. Son modèle repose sur le calcul d'une contrainte effective sur les noeuds d'une chaîne discrète modélisant la ligne de dislocation. La force totale s'exerçant sur chacun des noeuds résulte de la contrainte appliquée, des interactions élastiques avec les autres segments et d'une tension de ligne. La tension de ligne est alors calculée en fonction de la courbure locale de la ligne, ajustée géométriquement par un arc de cercle passant par les deux noeuds premiers voisins (cf. fig. 22). Connaissant la force en plusieurs points, une minimisation de l'énergie totale de la ligne peut être effectuée en déplaçant chacun des noeuds articulant la ligne jusqu'à sa position d'équilibre.

Bacon (1967) a vérifié qu'une telle description converge vers la solution analytique continue lorsque la discrétisation des lignes augmente. Malheureusement, cette méthode n'a pu être utilisée que dans des cas simples, par exemple celui du calcul de la courbure d'équilibre d'une source de Frank-Read (Foreman et Bacon 1967). En effet, son utilisation est limitée par un coût de calcul prohibitif dans le cas de fortes courbures locales.

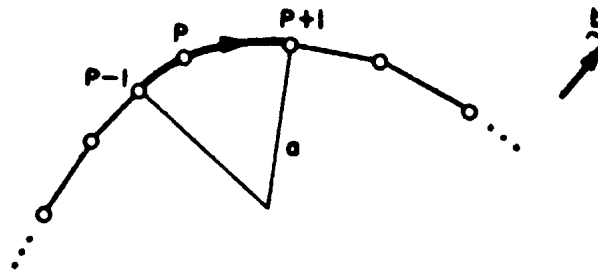


Fig. 22 : Schéma du modèle discret de ligne défini par Brown (1964) pour calculer la self-contrainte en un point  $P$  d'une ligne continue. Le segment contenant le point  $P$  est un arc de cercle passant par les points  $P-1$ ,  $P$  et  $P+1$ . Tous les autres segments connectés sont rectilignes.

Dans le cadre de notre simulation, nous proposons un nouveau modèle de discrétisation de la courbure de dislocation, adapté aux exigences d'une dynamique sur réseau à 3D : "le modèle coin-vis". Ce modèle s'appuie sur la définition des dislocations polygonales qui reproduisent bien à grande distance les solutions analytiques continues (Hirth et Lothe 1982, Kroupa 1962, Liu et Li 1966, Sharpe 1962, Yoffe 1960). On schématise la courbure des lignes de dislocations à l'aide d'une série de segments interconnectés n'ayant que deux caractères de ligne possibles par vecteur de Burgers, coin et vis.

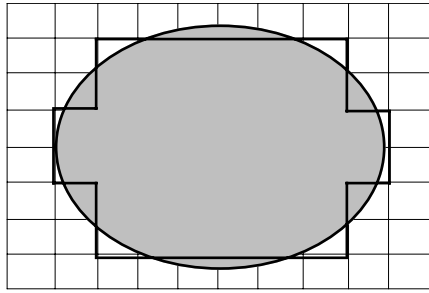


Fig. 23 : Représentation schématisique d'une boucle de dislocation dans le modèle discret de dislocations "coin-vis". Sur un réseau discret (ligne en pointillés) des segments de dislocations rectilignes interconnectés de caractère vis et coin (trait gras) reproduisent de manière discrète le contour d'une boucle continue (aire grisée).

Cette nouvelle méthode de discrétisation est schématisée sur la figure 23 pour une boucle de dislocation glissile elliptique. Chaque segment de ligne, en trait gras sur la figure, est confondu avec une direction du réseau de simulation de type  $\langle 110 \rangle$  pour les vis et  $\langle 112 \rangle$  pour les coins. Ses extrémités sont nécessairement confondues avec un noeud du réseau ce qui conduit à un nombre fini de valeurs possibles pour la longueur de chaque segment. La définition de 18 directions de segments de dislocations est suffisante pour décrire les douze systèmes de glissement d'un matériau de structure CFC (cf. Tableau 1).

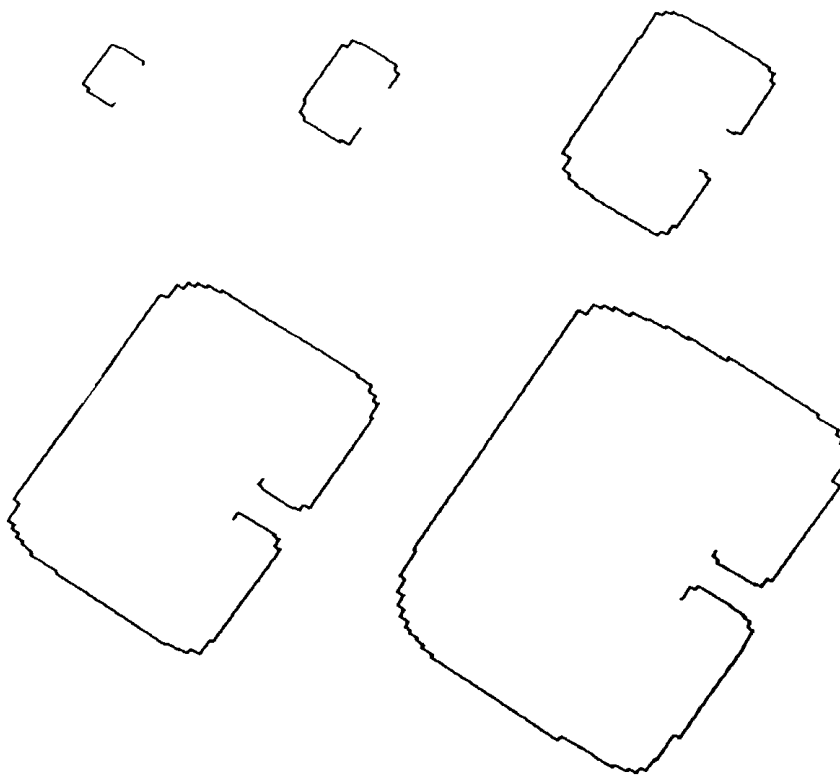
Vecteur de Burgers	$\bar{1}01$	$101$	$011$	$\bar{1}10$	$110$	$01\bar{1}$
Direction de déplacement de la vis	$\bar{1}2\bar{1}$	$\bar{1}21$	$2\bar{1}1$	$11\bar{2}$	$1\bar{1}\bar{2}$	$2\bar{1}\bar{1}$
Direction du glissement dévié	$121$	$12\bar{1}$	$21\bar{1}$	$\bar{1}\bar{1}\bar{2}$	$\bar{1}1\bar{2}$	$211$

Tableau 1 : Table des 18 directions utiles pour décrire tous les systèmes de glissement d'une structure CFC à l'aide du modèle "coin-vis".

Lors du déplacement d'un segment de dislocation, les variations de la longueur de ligne totale et de la courbure sont accommodées, soit par allongement des segments existants, soit par incorporation de segments nouveaux le long de la ligne. L'insertion de nouveaux segments est un problème sensible qui mérite d'être détaillé. Pour ne pas introduire de fortes perturbations sur la ligne, il est indispensable que les solutions topologiques envisagées pour incorporer les segments ne s'accompagnent jamais d'une variation de l'énergie de ligne à l'instant initial. Une solution consiste alors à insérer des segments de longueur initiale nulle. Le caractère de ces segments "invisibles" se déduit

d'une règle géométrique simple vérifiant à chaque instant l'alternance des deux caractères vis et coin. A l'aide de cette règle on différencie deux cas topologiques distincts:

- Le premier concerne l'insertion de nouveaux segments aux points de discontinuité d'une ligne. Par définition ces points ne peuvent être que des points d'ancrage ou d'émergence en surface. L'addition de nouveaux segments est, dans ce cas, nécessaire à chaque fois qu'un segment en contact par une de ses extrémités avec un point de discontinuité doit être déplacé. Ce mécanisme est illustré sur la figure 24, où l'on décrit les différentes étapes de fonctionnement d'une source de Frank et Read. A chaque point d'ancrage de la source de nouveaux segments sont insérés continuellement permettant à la ligne de tourner autour des deux points fixes.



*Fig. 24 : Cinq images successives du fonctionnement d'une source de Frank-Read décrite à l'aide du modèle de dislocations "coin-vis".*

- Le second cas concerne la discrétisation d'une courbure locale forte. Le réalisme de notre modèle "coin-vis" est alors déterminé par le nombre de segments utilisés par unité de longueur. Comme pour le modèle de Brown, le coût de calcul d'une description de la courbure des dislocations augmente rapidement avec le nombre de segments pris en compte. Il est donc indispensable de contrôler le nombre de segments nécessaires pour la description d'une courbure donnée. Une solution empirique employée durant les simulations consiste à estimer localement la courbure des lignes en calculant pour chaque segment,  $n$ , plus grand qu'une taille critique (par exemple  $l_c=0.4 \mu\text{m}$ ), la longueur de ses



deux segments mitoyens  $n-1$  et  $n+1$  (fig. 25 a ). Si la longueur de l'un d'entre eux est elle même trop grande, c'est-à-dire dépasse la longueur critique,  $l_c$ , alors la courbure à modéliser est nécessairement forte. Il faut alors discrétiser plus finement la ligne en ajoutant de nouveaux segments. Ainsi le coût de discrétisation des lignes de dislocation est il fixé par le choix de  $l_c$ .

On "découpe" le segment considéré en deux et on insère en son centre un segment de longueur nulle et de caractère différent (fig. 25 a). Cette opération accorde instantanément à la ligne la possibilité de mieux ajuster sa courbure par déplacement des nouveaux segments vers leur position d'équilibre respective (fig. 25 b).

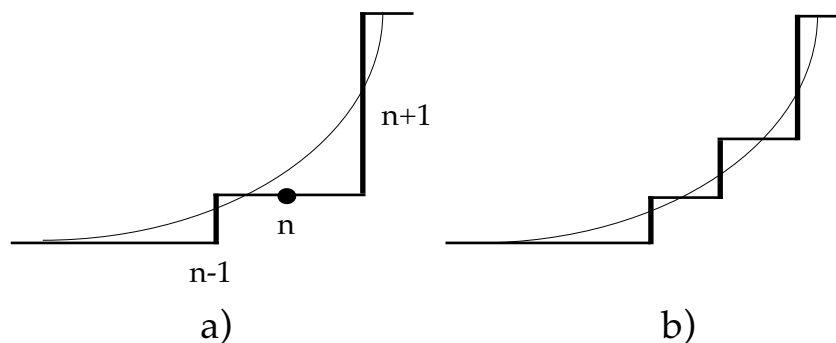


Fig. 25 : Illustration de la méthode de discrétisation d'une courbure locale forte. Les segments en traits épais représentent la ligne de dislocation décrite par le modèle "coin-vis", la ligne continue en trait fin suggère la solution équivalente pour une ligne de dislocation continue. En a) les segments  $n$  et  $n+1$  sont grands et la courbure localement forte est insuffisamment discrétisée. On coupe alors le segment  $n$  en deux et on ajoute en son centre un segment de longueur nulle de même caractère que les segments  $n+1$  et  $n-1$ . b) A l'équilibre, la ligne discontinue peut alors reproduire plus fidèlement la courbure.

Inversement, si un segment de dislocation de longueur nulle existe sur la ligne et si sa présence n'est pas utile, c'est à dire si la courbure locale est faible, il peut être éliminé par l'opération inverse. Ces deux processus, automatisés dans la simulation, contribuent à réduire au minimum nécessaire le nombre total de segments décrivant une ligne de dislocation courbée.

## II-3. CALCUL DES FORCES

### **A. Interactions élastiques**

La détermination du champ de contraintes d'un ensemble de segments de forme quelconque par décomposition en une succession de segments rectilignes, est devenue

une technique numérique classique (Hirth et Lothe 1982). Cela permet de ramener le problème complexe du champ de contrainte associé à des courbures continues à une sommation de champs de self-contrainte de segments rectilignes. Cette méthode a déjà été employée avec succès dans de nombreux calculs statiques, par exemple pour le calcul de l'énergie élastique des boucles de dislocations (Jossang *et al.* 1965, Liu et Li 1966), pour le calcul de la tension de ligne (Barnett *et al.* 1972, Bacon *et al.* 1973) ou le calcul de la dilatation autour des boucles (Condat 1977).

D'après de Wit (1967) l'expression des éléments du tenseur des contraintes,  $\sigma_{ij}$ , engendré en un point  $I'$  (fig. 26) par une dislocation rectiligne de vecteur de Burgers  $\mathbf{b}$  dans l'approximation de l'élasticité isotrope est donnée par :

$$\sigma_{ij} = \frac{\mu b_n}{8\pi} \left( \xi_{ijn} + \frac{2}{(1-\nu)} \vartheta_{ijn} \right) \quad (7)$$

avec

$$\xi_{ijn} = q_{,mqq} (\varepsilon_{jmn} t_i + \varepsilon_{imn} t_j) \quad (8)$$

$$\vartheta_{ijn} = \varepsilon_{kmn} (q_{,mij} - q_{,mqq} \delta_{ij}) t_k \quad (9)$$

On utilise ici la notation d'Einstein pour les indices sommés.  $\mu$  et  $\nu$  sont respectivement le module de cisaillement et le coefficient de Poisson,  $\delta_{ij}$  est le symbole de Kronecker et  $\varepsilon_{ijk}$  un opérateur de permutation dont les seules valeurs non nulles sont

$$\varepsilon_{123} = \varepsilon_{231} = \varepsilon_{312} = 1 \quad \text{et} \quad \varepsilon_{132} = \varepsilon_{321} = \varepsilon_{213} = -1. \quad (10)$$

La distance euclidienne du point  $I'$  à la ligne de dislocation est égale à la norme du vecteur  $\rho$  (fig. 26) tel que :

$$\rho = \mathbf{R} - L\mathbf{t} \quad \text{et} \quad L = \mathbf{R} \cdot \mathbf{t} \quad (11)$$

où  $\mathbf{R}$ , est la distance entre tout point  $I$  de la ligne de dislocation et le point  $I'$  (fig. 26). La variable,  $q$ , est le résultat de l'intégrale le long de la ligne :

$$q = \int \mathbf{R} \cdot d\mathbf{l} \quad (12)$$

et  $q_{,ijm}$  la dérivée d'ordre trois de  $q$ .

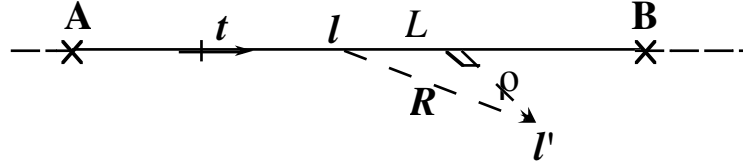


Fig. 26 : Vecteurs entrant dans la définition du tenseur des contraintes d'un segment de dislocation rectiligne AB d'après de Wit (1967). Le vecteur unitaire  $\mathbf{t}$  est parallèle à la direction de la ligne,  $\mathbf{R}$  est la distance vectorielle entre un point courant de la ligne et un point quelconque  $I'$  de l'espace où l'on veut connaître le champ de contrainte.  $\rho$  est la distance euclidienne entre  $I'$  et la direction de la ligne de dislocation.

L'expression du champ de self-contrainte d'un segment de dislocation rectiligne proposé par de Wit est mieux adaptée aux calculs à 3D que d'autres formes données par divers auteurs (Hirth et Lothe 1982, Brown 1964, Li 1964, Indenbom et Orlov 1967, Willis 1970). En effet, la contribution de toutes les dislocations est exprimée tensoriellement dans un référentiel unique et non sur la base de repères locaux liés à chaque segment de dislocation. Afin de pouvoir utiliser numériquement ces formules, seule l'expression analytique de la dérivée troisième de  $q$  manquait au début de notre travail. Son calcul est détaillé en Annexe I.

L'expression de de Wit peut être réécrite sous une forme analytique réduite (Devincre et Condat 1992) si l'on définit le vecteur  $\mathbf{Y}$  :

$$\mathbf{Y} = \mathbf{R} + \mathbf{Rt} = (\mathbf{L} + \mathbf{R})\mathbf{t} + \rho \quad (13)$$

et l'opérateur tensoriel symétrique :

$$[\mathbf{abc}]_{ij}^s = \frac{1}{2} \left( (\mathbf{a} \times \mathbf{b})_i c_j + (\mathbf{a} \times \mathbf{b})_j c_i \right). \quad (14)$$

Après quelques simplifications (cf. Annexe I) on trouve une expression opérationnelle permettant le calcul des différentes composantes du tenseur des contraintes engendré en tout point,  $I'$ , par un segment de dislocation rectiligne AB :

$$\sigma_{ij}^{(AB)} = \left[ \frac{\mu}{\pi \cdot Y^2} \left( [\mathbf{bYt}]_{ij}^s - \frac{1}{(1-\nu)} [\mathbf{btY}]_{ij}^s - \frac{1}{2(1-\nu)} (\mathbf{b}, \mathbf{Y}, \mathbf{t}) (\delta_{ij} + t_i t_j + \phi_{ij}) \right) \right]_A^B \quad (15)$$

où  $(\mathbf{b}, \mathbf{Y}, \mathbf{t})$  est le produit mixte et

$$\phi_{ij} = \frac{2}{Y^2} \left( \rho_i Y_j + \rho_j Y_i + \frac{L}{R} Y_i Y_j \right). \quad (16)$$

Cette écriture du tenseur des contraintes différencie la contribution des composantes purement vis ou coin d'un segment de dislocation. Dans le cadre de notre simulation qui se restreint à ces deux seuls caractères, une économie importante de calcul est obtenue en divisant la formule générale en deux parties en fonction du caractère du segment considéré.

La programmation des formules (15) et (16) soulève quelques difficultés numériques qui méritent d'être détaillées:

- Tout d'abord, la divergence des éléments du tenseur des contraintes sur un segment se prolonge mathématiquement au-delà de son extrémité. Ce point est critique dans le cas de systèmes à 3D. Il faut alors contrôler à chaque instant que l'on ne calcule pas la contrainte interne dans le prolongement d'un segment. La nature discrète de l'espace de simulation nous fournit une solution simple. Comme les segments de dislocations sont astreints à se déplacer sur un réseau rigide, il suffit de décaler légèrement les points de calcul de la contrainte interne par rapport aux directions du réseau de simulation. On élimine ainsi systématiquement tout risque de se trouver dans le prolongement d'un segment (en pratique, on déplace dans la direction (111) le noeud où l'on calcule le champ de contrainte interne, d'une faible fraction du paramètre de réseau).

- Deuxièmement, la solution mathématique du champ de contraintes aux extrémités d'un segment de dislocation de longueur finie n'est pas unique (Bacon *et al.* 1979). C'est pourquoi l'utilisation d'expression du champ de self-contrainte d'un segment n'est justifiée que dans le cas de segments interconnectés. Ce problème mathématique reflète une propriété physique importante des dislocations : celles-ci ne peuvent jamais s'interrompre en un point de l'espace, mais seulement sur une interface ou un autre défaut (surface, joint, précipité,...). En pratique, cette condition limite le réalisme des conditions initiales choisies pour les simulations (cf. chapitre III-4) et impose une gestion numérique attentive de l'interconnectivité des segments construisant les lignes de dislocations.

- Troisièmement, comme le montre la fig. 27, des éléments inhabituels du tenseur de self-contrainte, absents dans le cas d'une dislocation rectiligne infinie, apparaissent pour les segments coin. Ces nouvelles composantes sont essentielles, car ce sont elles qui permettent la modélisation d'une courbure des dislocations à grande distance. Par exemple, l'existence d'un élément de cisaillement  $\sigma_{yz}$  peut se comprendre aisément. Celui-ci est à l'origine du couple exercé sur les segments de type coin ou mixte pour ramener la ligne dans une direction vis de plus basse énergie élastique.

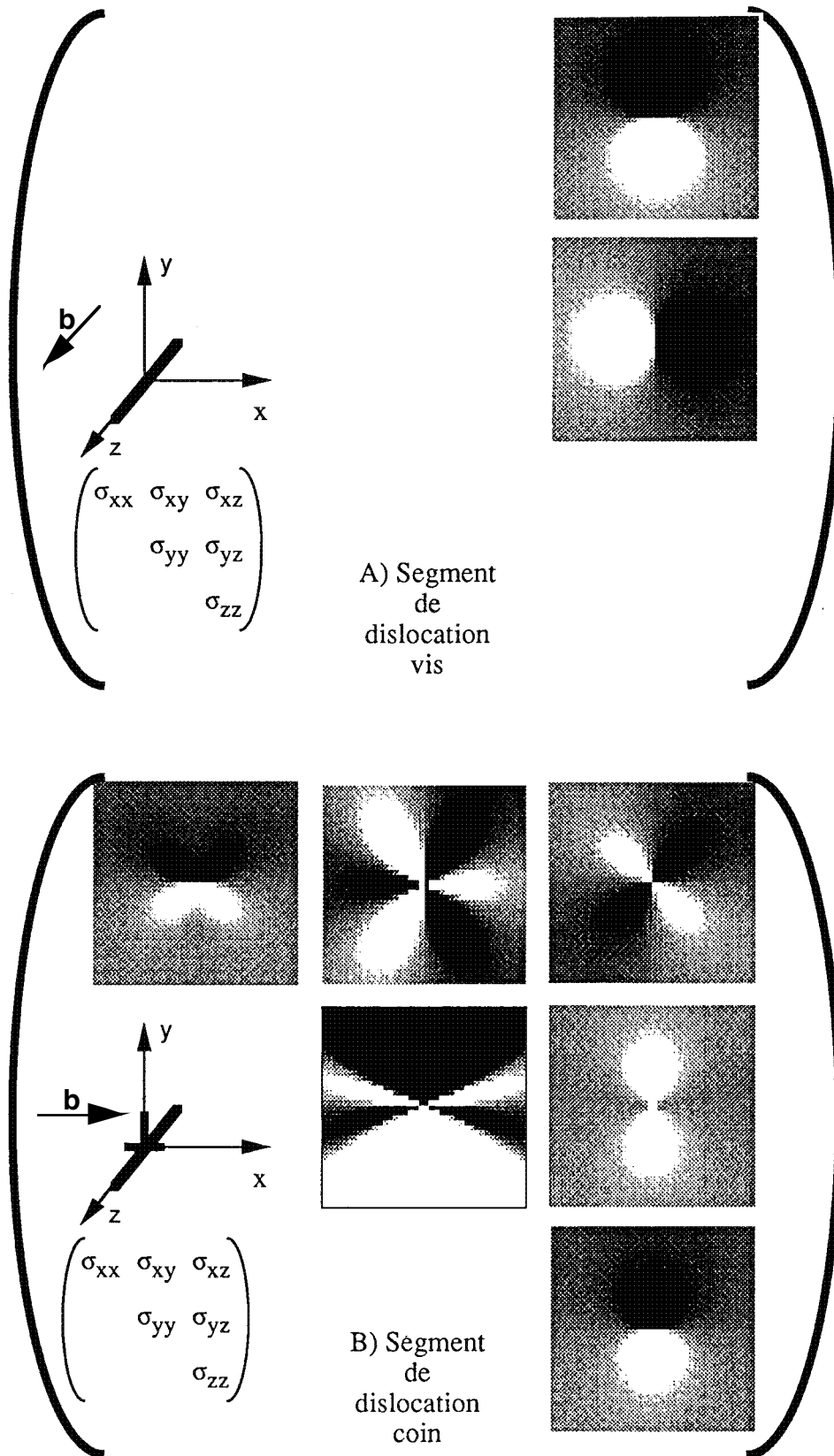


Fig. 27 : Illustration du profil du champ de self-contrainte d'un segment de dislocation dans le plan normal à la direction de la ligne et passant par son centre. Le spectre d'intensités allant du noir au blanc correspond au passage d'une contrainte minimale à une contrainte maximale de signe opposé. a) segment de caractère vis, b) segment de caractère coin.

Une fois encore, l'existence d'une divergence de ces composantes du tenseur des contraintes aux extrémités des segments (fig. 28) constitue un problème numérique difficile (Indenbom *et al.* 1967). Une solution pratique est fournie par la discrétisation des longueurs des segments dans notre modèle "coin-vis". Le réseau de simulation impose en effet aux segments une longueur minimale de  $a/\sqrt{2}$  pour les vis et de  $a\sqrt{6}/2$  pour les coins (où  $a$  est le paramètre du réseau de simulation). Nous avons vérifié que dans ces deux cas, qui sont les plus critiques et pour des contraintes internes calculées au centre des segments, l'erreur commise ne dépasse pas quelques pour cent.

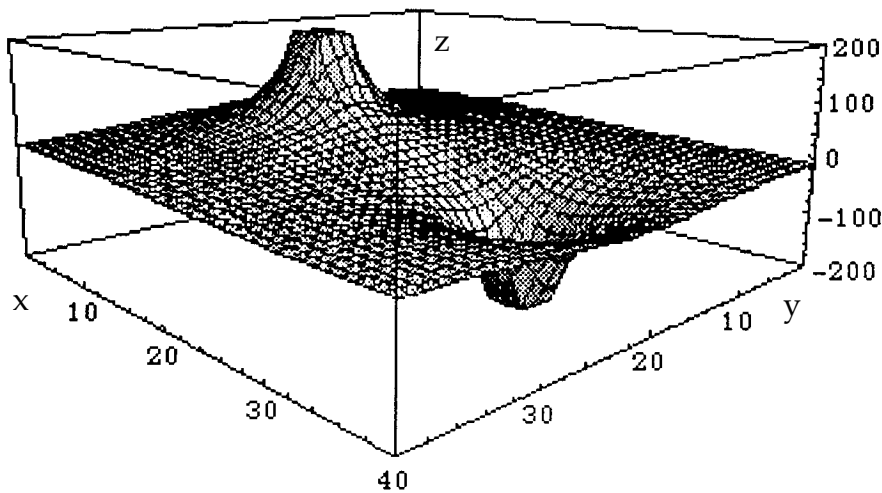


Fig. 28 : Variations spatiales de la composante du champ de contrainte  $\sigma_{xy}$  autour d'un segment de dislocation coin ( $\mathbf{t} \parallel (010)$ ,  $\mathbf{b} \parallel (001)$ ) dans son plan de glissement.  $\sigma_{xy}$  diverge aux deux extrémités du segment de longueur  $L=2000b$  et exerce le long de la ligne un couple ramenant le segment coin dans la direction vis. Dimension du plan  $xOy = 4000bx4000b$ .  $\sigma_{xy}$  est reproduit dans la direction  $Oz$  en unités réduites ( $10^{-4}\mu$ ).

## B. Force appliquée à une dislocation

L'étude des propriétés dynamiques d'une dislocation polygonale suppose un calcul de la force totale agissant sur chacun des segments qui la constituent. Cette force se décompose en cinq contributions différentes :

- La force due au champ de contrainte homogène appliqué,  $\sigma_{app}$ .
- La force due au champ de contrainte interne associé aux autres segments de dislocations,  $\sigma_{int}$ .
- La force de friction (force de Peierls).
- La tension de ligne.
- La force image liée à l'existence de bords libres.

- Les deux premières composantes de la force se calculent classiquement en tous points des segments par la relation de Peach-Kœhler. La stratégie adoptée lors de nos calculs consiste à estimer la force sur les segments uniquement en leur centre. Bien que ce calcul soit rigoureux au point considéré, son extension au reste de la ligne lors de la résolution de l'équations de mouvement du segment entier, représente une approximation. Il faut, en effet, supposer, comme cela se fait couramment, que la contrainte interne varie lentement dans l'espace. Cette simplification est nécessaire pour répondre à deux exigences de notre modèle : tout d'abord, la réduction à son strict minimum du nombre d'interactions de paires calculées qui varie comme le carré du nombre de segments pris en compte. Ensuite, le calcul de  $\sigma_{int}$  au centre des segments constitue la solution qui minimise l'effet des anomalies du champ de self-contrainte aux extrémités des segments.

- La troisième composante de la force totale concerne la contrainte de friction de réseau. Celle-ci est supposée constante dans le plan de glissement et elle s'oppose toujours au déplacement quel qu'en soit le sens. Sa valeur est faible dans les métaux CFC (typiquement quelques  $10^{-5} \mu$ , soit  $3 \cdot 10^{-5} \mu = 1.68 \text{ MPa}$  pour le cuivre dans notre simulation). Elle peut être beaucoup plus importante dans les cas de structures de coeur tridimensionnelles (métaux CC) ou de matériaux covalents.

- La quatrième composante de la force totale est liée au mode de discrétisation choisi pour la ligne de dislocation. Lorsqu'un segment se déplace de manière rigide dans son plan de glissement, la longueur,  $L$ , des segments latéraux se modifie instantanément pour maintenir la connectivité de l'ensemble de la ligne de dislocation. Cette variation de longueur induit une force de rappel équivalente à une tension de ligne élastique (Friedel 1964, Kirchner 1984). L'origine de cette force se comprend aisément à partir de l'expression de l'énergie élastique totale d'une dislocation polygonale. Cette énergie peut être décomposée en deux termes : d'une part, la somme des énergies d'interaction entre différents segments composant la ligne, d'autre part la somme de l'énergie de ligne (self-énergie,  $E_{self}$ ) fonction de la longueur de chacun des segments (Jossang *et al.* 1965, de Wit 1967).

$$E_{\text{élast.}} = \sum_i E_{\text{self}}^{(i)} + \sum_{i>j} E_{\text{int.}}^{(i,j)} \quad (17)$$

La force virtuelle recherchée est donc, au signe près, le gradient de l'énergie de ligne des dislocations. Dans le cadre de notre modèle "coin-vis", un segment est toujours normal à ses deux premiers voisins (fig. 29). Ainsi, lorsque le segment  $n$  de la ligne se déplace de la position  $x$  à la position  $x+\delta x$ , les variations de la self-énergie proviennent uniquement des variations de longueur des segments voisins  $n-1$  et  $n+1$ . La force virtuelle

$\mathbf{F}^{(n)}$  qui s'exerce sur le segment  $n$  se réduit donc au gradient de self-énergie des deux segments latéraux :

$$\mathbf{F}^{(n)} = -\left(\nabla E_s^{(n-1)} + \nabla E_s^{(n+1)}\right) \quad (18)$$

avec

$$\nabla E_s^{(n)} = \frac{\partial E_s^{(n)}}{\partial x_i} = \frac{\partial L^{(n)}}{\partial x_i} \frac{\partial E_s^{(n)}}{\partial L^{(n)}} \quad (19)$$

$x_i (i=1,3)$  est le vecteur de déplacement et  $L^{(n)}$  la longueur du segment  $n$ . Le modèle de dislocation "coin-vis" impose par construction  $\partial L^{(n)} / \partial x_i = \pm 1$ , quel que soit le déplacement effectué.

Finalement,  $\mathbf{F}^{(n)}$ , la tension de ligne exercée sur la dislocation au point  $n$  se calcule à partir de l'équation (18) et de l'expression du gradient de l'énergie de ligne d'un segment de dislocation :

$$\nabla E_s^{(n)} = -\frac{\partial L^{(n)}}{\partial x_i} \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \left\{ \begin{array}{l} \left[ b^2 - \nu(\mathbf{b} \cdot \mathbf{t})^2 \right] \left( \ln \frac{2L^{(n)}}{r_0} + 1 \right) \\ -\frac{1-2\nu}{4(1-\nu)} \left[ b^2 - (\mathbf{b} \cdot \mathbf{t})^2 \right] - (2-\nu)(\mathbf{b} \cdot \mathbf{t})^2 \end{array} \right\} \quad (20)$$

Par analogie avec le modèle discret de Brown (1964), ce calcul de la tension de ligne est l'équivalent de l'estimation de la tension de ligne à partir d'un calcul de courbure locale.

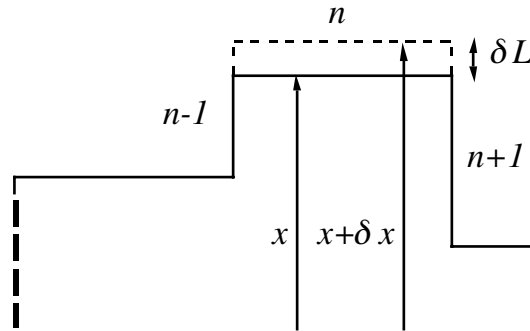


Fig. 29 : Exemple de déplacement d'un segment, portion d'une ligne de dislocation "coin-vis". Le glissement du segment,  $n$ , affecte exclusivement la longueur de ses deux premiers voisins,  $n-1$  et  $n+1$ .

Il faut souligner que l'expression (18) de la tension de ligne dépend indirectement des limites, inférieure et supérieure, du rayon de coupure utilisé pour calculer l'énergie de ligne d'un segment de dislocation (Hirth et Lothe 1982). Dans le cas d'une dislocation rectiligne isolée, le choix de ces limites est assez clairement établi (Wertmann et Wertmann 1979). Par contre, la définition d'un rayon de coupure extérieur,  $R_c$ , pour l'énergie élastique devient difficile dans le cas général d'une dislocation immergée dans une



microstructure. En effet, l'organisation des dislocations peut écranter partiellement leur champ de contrainte à grande distance. C'est pourquoi, on rencontre dans la littérature divers ajustements de l'énergie ou de la tension de ligne. Dans l'expression simplifiée

$$T = C\mu b^2 \quad (18\text{-bis})$$

la constante  $C$  peut, suivant les cas, varier de 0.5 (Friedel 1964) à 1 (Bacon 1967, Foreman 1967). Afin de lever cette indétermination, nous avons ajusté l'expression analytique de la tension de ligne (18) sur des mesures expérimentales dues à Mughrabi (1973). Il s'agit là, à notre connaissance, des seules valeurs disponibles dans la littérature concernant le cuivre. Elles ont été obtenues par microscopie électronique en transmission sur des microstructures de dislocations produites en fatigue et figées sous contrainte par irradiation aux neutrons. A partir de la courbure moyenne, Mughrabi obtient  $T = 2 \cdot 10^{-9}$  N et  $0.97 \cdot 10^{-9}$  N respectivement, pour les directions vis et coin. En prenant une moyenne géométrique, c'est à dire en remplaçant les boucles de dislocations elliptiques par des boucles circulaires de même surface, on arrive à la valeur moyenne  $C = 0.63$ , admise aujourd'hui dans de nombreux calculs élastiques pour les métaux CFC (Schoeck et Frydman 1972, Kirchner 1984).

Enfin, la tension de ligne comporte également une composante non locale, relativement faible, qui provient des interactions élastiques d'un segment avec les segments de la même ligne autres que les plus proches voisins (Kocks, Argon et Ashby 1975). Cette composante est naturellement calculée dans la simulation avec les autres interactions de paires.

- La cinquième et dernière composante de la force agissant sur les segments est associée aux dimensions finies de la boîte de simulation. L'énergie d'une dislocation isolée ne peut être calculée que dans un système de dimension finie car elle diverge lorsque les dimensions linéaires du système divergent. Si on déplace une dislocation, l'énergie élastique totale varie instantanément car la distance de la ligne aux limites du système change. Cette variation d'énergie implique l'existence d'une force virtuelle sur les lignes de dislocations :

$$\mathbf{F} = -\nabla E_{\text{élast}} \quad (21)$$

On montre ainsi, qu'en présence d'une surface, toute dislocation ressent une "force image" dirigée vers l'extérieur, qui tend à l'éliminer pour minimiser l'énergie élastique totale (Friedel 1964, Hirth et Lothe 1982). L'expression exacte de cette "force image" est difficile à calculer dans le cas le plus général. Dans notre cas, il est possible de faire une approximation raisonnable qui a, de plus, l'avantage de minimiser le temps de calcul de

cette contribution. Pour une dislocation immergée dans une microstructure organisée, l'effet des bords libres ne se fera sentir qu'à une distance inférieure au rayon d'écrantage des contraintes à longue distance. En conséquence, nous négligeons la contribution de la "force image" sur les segments éloignés des surfaces pour ne considérer que la variation de self-énergie des segments en contact avec un bord.

La définition de cette "force image réduite" est équivalente à celle de la tension de ligne définie plus haut. Sa valeur se déduit directement de la variation de la longueur de ligne imposée par les conditions aux limites. Lorsqu'un segment touche une surface (d'orientation {100}) et se déplace dans son plan de glissement, sa longueur de ligne est modifiée. Il en résulte une "tension de surface" qui favorise les mouvements tendant à diminuer la longueur totale de ligne.

Cette simplification qui restreint l'action de la force image aux seules dislocations en contact avec une surface, est d'autant meilleure que la microstructure est bien auto-écrantée. Elle permet de prendre en compte l'essentiel des effets dynamiques et statiques résultant de l'existence de surfaces libres : élimination accélérée des boucles, élévation de la contrainte d'écoulement, réorientation de la ligne pour qu'elle soit normale à la surface et préférentiellement de direction vis.

En pratique, la prise en compte de cette "tension de surface" lors des simulations ne nécessite aucun traitement particulier. Il faut seulement veiller à raccourcir ou allonger les segments se déplaçant en surface pour maintenir leur extrémité exactement sur les bords. Alors, la contribution de cette force intervient spontanément dans le calcul de la tension de ligne sur les segments.

#### II-4. VALIDATION DU MODÈLE DE DISLOCATIONS "COIN-VIS"

Au cours de ce chapitre, nous avons défini un modèle de discrétisation de l'espace et des lignes de dislocations adapté à l'étude des dislocations à une échelle mésoscopique. Avant d'entreprendre la simulation des propriétés dynamiques de celles-ci, il est essentiel de tester le réalisme de notre modèle par comparaison avec les résultats classiques de la théorie élastique des dislocations. A cette fin, nous avons procédé à l'étude de quelques propriétés statiques importantes des dislocations (Devincre et Condat 1992).

Les premiers calculs effectués testent le réalisme du champ de contrainte des dislocations dans le modèle "coin-vis". Le champ de self-contrainte de deux boucles de dislocation identiques, A et B, issues de notre modèle discret mais contenant des nombres de segments différents, est comparé au champ de contrainte d'une boucle polygonale

régulière, C, formée de 16 segments de dislocation. Cette dernière configuration sert de référence, Bacon et Crocker (1965) ayant vérifié qu'il s'agit là d'une très bonne approximation des boucles de dislocation circulaires continues. Le premier modèle, la boucle A, équivaut à la solution de plus faible discrétisation réalisable à partir de deux directions de ligne: une boucle carrée (fig. 30). Le second modèle, la boucle B, composé de 28 segments, est élaboré sur la base de la boucle polygonale de référence C en remplaçant chaque dislocation de caractère mixte par une succession appropriée de segments coin et vis. La condition d'origine mécanique d'une aire égale pour les trois modèles de boucle est utilisée pour permettre la comparaison des champs de self-contrainte (Hirth et Lothe 1982).

Les variations des différentes composantes du tenseur des contraintes sont calculées en fonction de la distance au centre de ces boucles dans deux directions 1 et 2 illustrées sur la figure 30. Ces deux directions sont contenues dans le plan de glissement : la direction 1 est parallèle à la direction vis, la direction 2 est tournée de  $45^\circ$  par rapport à la première (fig. 30). Ces directions d'observation ont été privilégiées, car ce sont elles qui font apparaître les plus forts écarts d'un modèle à l'autre.

Les calculs ont tous été effectués avec un module de Poisson de  $\nu=0.44$  et des distances exprimées en unités réduites  $r^*=r/r_0$  où  $r_0$  est le rayon d'une boucle de dislocation continue circulaire de même aire que celle des boucles testées.

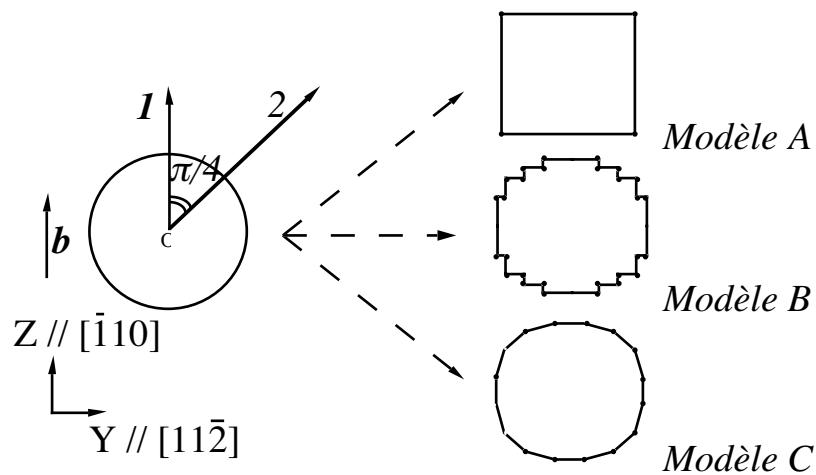


Fig. 30 : Différentes approximations d'une boucle circulaire obtenues à l'aide de différentes discrétisations de la courbure d'une ligne de dislocation. Les boucles A et B sont construites à partir du modèle de ligne "coin-vis" défini dans le texte. Le modèle C est une boucle polygonale régulière à 16 cotés, assimilable en pratique à une boucle de dislocation circulaire.

La figure 31 reproduit les variations de  $\sigma_{xz}$ , l'unique composante non nulle du tenseur des contraintes dans la direction 1. On vérifie que le modèle de boucle discrète B reproduit de façon très satisfaisante le champ de contrainte associé au modèle C. Inversement, le modèle de boucle carrée apparaît insatisfaisant à courte distance ( $r^* \approx 1$ ). Ce résultat est en accord avec les calculs de Kroupa (1962), qui montrent que le modèle de boucle carrée ne constitue une approximation satisfaisante de la boucle circulaire qu'à des distances supérieures à  $2r_0$ . En effet, à une distance de  $r > 2r_0$  l'écart entre les modèles A et le modèle de référence, C, se réduit à moins de 10%.

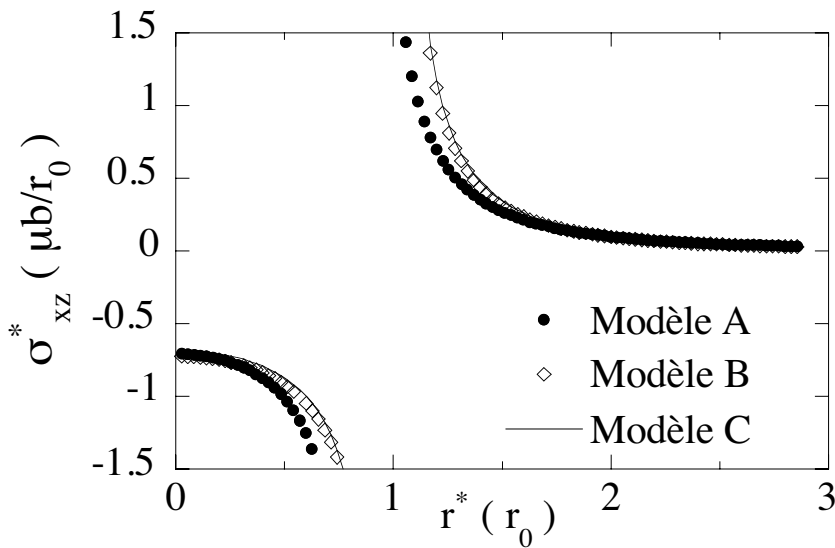


Fig. 31 : Variation de la self-contrainte de cisaillement  $\sigma_{xz}$  des modèles de boucle A, B et C dans la direction 1 définie sur la figure 31. Les cercles pleins correspondent au modèle A, les losanges au modèle B et le trait continu au modèle C. L'origine des distances est prise au centre des boucles.

Pour la composante  $\sigma_{xz}$ , les résultats sont identiques dans les directions 1 et 2. Dans la direction 2, nous ne discutons donc que la seconde composante non nulle,  $\sigma_{xy}$ . L'existence d'une composante,  $\sigma_{xy}$ , du tenseur des contraintes dans le plan de glissement est liée à la nature finie des segments de dislocation et reflète à grande distance l'existence d'une courbure de la ligne. Cette fois, l'insuffisance du modèle de boucle carrée à reproduire à courte distance le champ de self-contrainte d'une boucle de dislocation circulaire est manifeste. A l'intérieur de la boucle A, la composante,  $\sigma_{xy}$ , est de signe opposé par rapport à la boucle de référence (fig. 32).

Par contre, le champ de la boucle B reste proche de celui du modèle de référence, C, pour les distances supérieures à  $2r_0$ . Nous notons donc qu'une discrétisation de la courbure beaucoup plus importante serait nécessaire pour reproduire exactement le champ de contraintes du modèle C à proximité de la ligne.

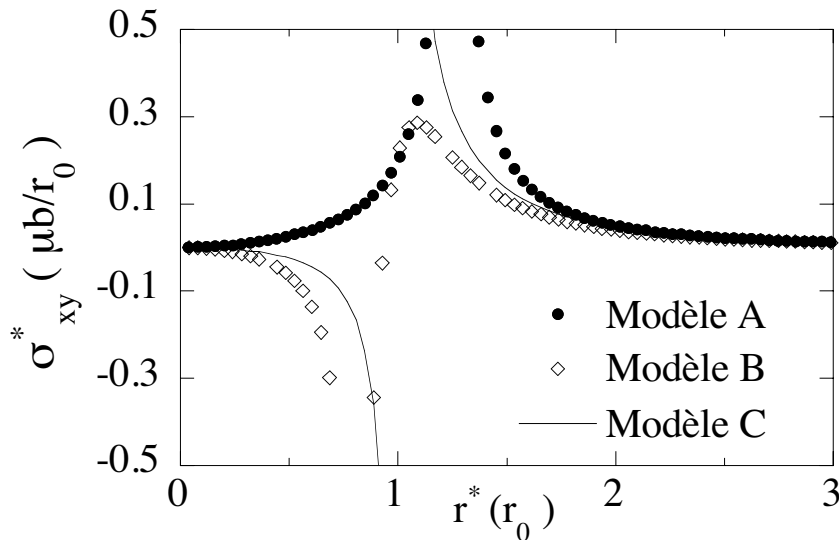


Fig. 32 : Mêmes conditions que la figure 31 mais avec l'élément du tenseur de self-contrainte  $\sigma_{xy}$  calculé dans la direction 2.

Ces calculs simples nous ont permis de vérifier que le modèle de dislocation "coin-vis" converge lentement vers la solution continue lorsque le nombre de segments utilisés pour modéliser la courbure des lignes augmente. Il est clair que le modèle "coin-vis" permet de reproduire les propriétés essentielles du champ de contrainte des dislocations. Cependant, sa description n'est pas parfaite à courte distance. Il serait alors illusoire d'essayer de reproduire exactement le champ de contrainte près d'une ligne continue. Seul la description du champ de déformation élastique à une échelle mésoscopique est ici recherché.

La seconde série de tests effectués concerne l'aptitude du modèle de dislocations "coin-vis" à reproduire la courbure d'équilibre d'une ligne de dislocation soumise à une contrainte extérieure. A cette fin, nous avons étudié les variations de la contrainte critique d'instabilité ou contrainte de Frank-Read,  $\tau_c$ , d'une ligne de dislocation ancrée à ses deux extrémités. Les solutions obtenues pour différents niveaux de discrétisation sont comparées aux solutions prédites par la théorie élastique en fonction de la longueur de ligne au repos,  $L$ .

Notre méthode numérique de recherche de la courbure d'équilibre des lignes de dislocations discrètes consiste à minimiser la force agissant sur chacun des segments. Cette procédure de minimisation est proche de celle utilisée dans les simulations à l'échelle atomiques et peut être effectuée à l'aide de l'algorithme standard de la différence centrale (Allen et Tildesley 1991). Nous avons calculé les valeurs de  $\tau_c$ , pour différentes

longueurs de ligne  $L$ , pour différents caractères de ligne au repos (vis ou coin pure) et pour différents niveaux de discrétisation représentés par un nombre constant de segments,  $N_d = 5, 9, 13, 17$  et  $37$ . Pour chacune des solutions, la contrainte  $\tau_c$  est définie comme la plus faible contrainte pour laquelle la procédure de minimisation des forces ne parvient plus à trouver de configuration stable (cf. Devindre et Condat 1992 pour le détail des calculs).

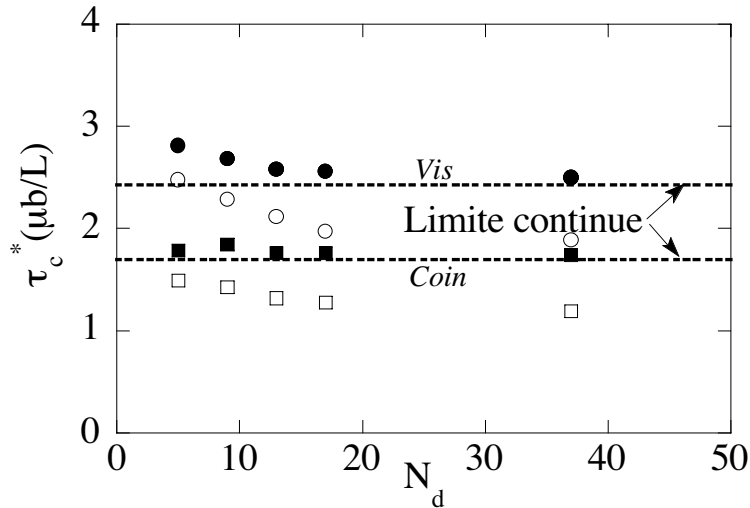


Fig. 33: Variation de la cission critique d'une source de Frank-Read,  $\tau_c^*$  (en unités réduites  $\mu b/L$ ) en fonction du nombre de segments,  $N_d$ , de discrétisation de la courbure pour une ligne initialement vis (cercle plein) et coin (carré plein). Le coefficient de Poisson est pris égal à  $\nu=1/3$  pour permettre une comparaison avec les résultats de Foreman (lignes pointillées). La longueur initiale des lignes est égale à  $L=21000b$ . Les symboles vides correspondent aux résultats obtenus en excluant de  $\tau_c^*$  la contribution des interactions élastiques.

Les variations de  $\tau_c$  en fonction de  $N_d$  avec des sources "coin-vis" sont reproduites sur la figure 33 pour une longueur initiale de ligne constante  $L$ . Comme dans le cas précédent, nos résultats sont comparés aux solutions d'un calcul semblable mais réalisé avec un modèle de discrétisation plus précis contenant toutes les orientations de ligne possibles (Bacon 1967, Foreman 1967).

Les solutions pour  $\tau_c$  convergent rapidement vers la solution continue lorsque  $N_d$  augmente. En pratique, toutes les sources de dislocations dont la courbure est discrétisée avec plus de 15 segments peuvent être considérées comme ayant convergé vers la solution prédite par Foreman (1967).

Sur la même figure nous avons tracé en complément des solutions du calcul complet pour  $\tau_c$  (marques pleines), les solutions obtenues lorsqu'on néglige du bilan total des forces les interactions entre différents segments (marques vides), c'est-à-dire la contribution non locale à la tension de ligne. Ce calcul démontre que la tension de ligne

locale représente environ 80% de la force totale s'opposant à la contrainte appliquée pour une boucle isolée. Lors des simulations des propriétés dynamiques des dislocations, il sera alors possible de tirer avantage de cette propriété de notre modèle. La comparaison des résultats de la simulation avec ou sans la prise en compte des interactions élastiques, permet de vérifier l'influence relative des interactions à longue et courte distance sur les propriétés plastiques et l'arrangement des microstructures (cf. chapitre V).

La dépendance de  $\tau_c$  en fonction de la longueur de ligne au repos,  $L$ , est donnée sur la figure 34. Ces calculs ont été réalisés pour une discrétisation en,  $N_d=17$  segments, seuil à partir duquel  $\tau_c$  converge vers le résultat prédit par la théorie élastique. Sur cette figure,  $\tau_c$  et  $L$  sont exprimés en unités réduites, respectivement  $\mu b/L$  et  $b$  afin de mieux souligner la dépendance logarithmique prédite par la théorie (de Wit et Koehler 1959, Foreman 1967) :

$$\tau_c = \frac{A}{2\pi} \left( \frac{\mu b}{L} \right) \left[ \log \left( \frac{L}{r_0} \right) + B \right] \quad (22)$$

où  $r_0 \approx b$  est le rayon de coeur des dislocations et  $A$  une constante égale respectivement à  $1/(1-\nu)$  et 1 pour des dislocations initialement vis et coin. La seconde constante,  $B$ , ajoute l'influence des interactions élastiques à la tension de ligne locale (Foreman 1967). Par exemple, Bacon (1967) a montré que la valeur de  $B$  varie de quelques pour-cent lorsqu'on considère une ligne ancrée par deux dislocations normales au plan de glissement de la source. Dans notre cas, l'existence de tels effets, ainsi que l'influence d'une contrainte de friction sont négligés et seules les variations de  $\tau_c$  avec la longueur de ligne initiale sont prises en compte.

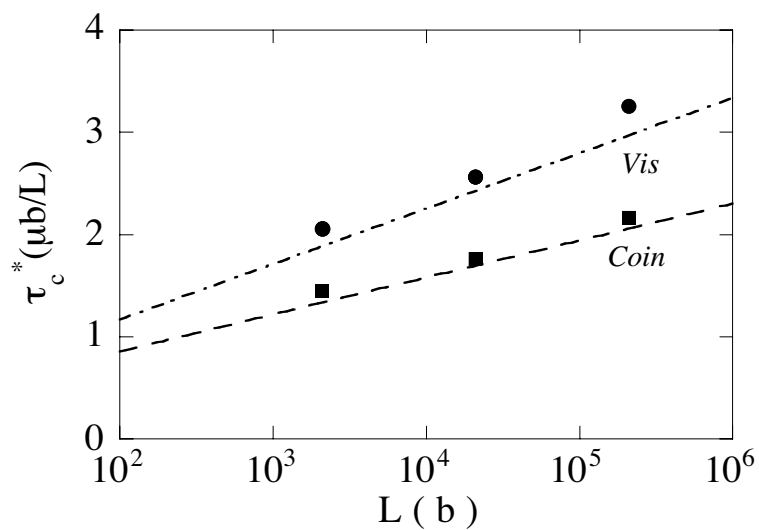


Fig. 34 : Variations de la cission critique d'une source de Franck-Read,  $\tau_c^*$  (en unités réduites) en fonction de la longueur initiale  $L$  d'une dislocation vis (cercles pleins) ou coin (carrés pleins). Le coefficient de Poisson est pris égal à  $\nu=1/3$  pour permettre une

comparaison avec les résultats de Foreman (lignes en pointillée). Le rayon de coeur et le niveau de partitionnement de la ligne sont respectivement fixés à  $r_0 = b$  et  $N_d = 17$ .

Le bon accord entre notre modèle "coin-vis" et les résultats de Foreman, montre que l'approche adoptée permet de reproduire de manière satisfaisante les propriétés d'équilibre d'une ligne de dislocation. Les courbures obtenues sont comparables à celles prédites par les calculs de la théorie élastique dans le cas de lignes de dislocations parfaites, continues, ancrées à leurs extrémités. Les sources, sous l'effet d'une force extérieure adoptent une courbure elliptique minimisant l'énergie élastique par unité de longueur. Cette anisotropie de la courbure de ligne est une manifestation géométrique de la différence d'énergie entre caractère vis et coin. Comme le montre la figure 35, une dislocation adopte toujours une courbure qui favorise le caractère vis de la ligne, quelle que soit sa direction initiale.

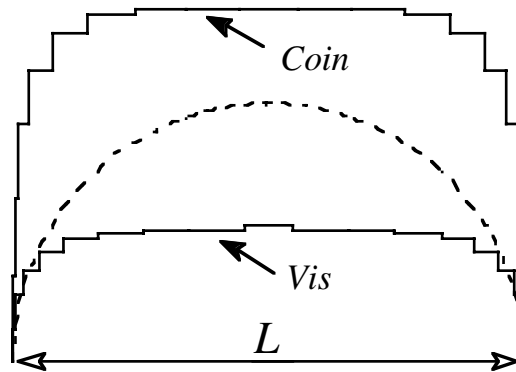


Fig. 35 : Configurations critiques de forme elliptique de deux segments de dislocations initialement coin et vis. Chacune des sources est discrétisée avec 37 segments. Le demi-cercle en pointillés sert de référence et correspond à la solution pour une ligne de dislocation continue avec  $\nu=0$ .

En résumé, nous avons vérifié que notre modèle géométrique "coin-vis" permet de reproduire les propriétés statiques des dislocations prédites par la théorie élastique. Cependant, la bonne aptitude de ce modèle à reproduire la contrainte d'instabilité d'une source de Frank-Read, même avec de très faibles niveaux de discrétisation, se conjugue avec de moins bonnes performances s'agissant du champ de self-contrainte d'une boucle de dislocations. Ces insuffisances ne représentent pourtant pas une limitation pour des simulations mésoscopiques car le franchissement de la forêt par les dislocations mobiles impose une discrétisation des lignes toujours supérieure à celle testée au cours du présent chapitre.



# **CHAPITRE III**

## **MÉTHODE DE SIMULATION DE LA DYNAMIQUE DES DISLOCATIONS**



### III. MÉTHODE DE SIMULATION DE LA DYNAMIQUE DES DISLOCATIONS

Au cours du chapitre précédent, nous avons défini un modèle de discrétisation de l'espace et des lignes de dislocation adapté à l'étude des propriétés des dislocations à trois dimensions et à une échelle mésoscopique. L'animation de ce modèle par simulation numérique doit permettre l'étude de la plasticité à l'échelle même de la formation des microstructures de dislocations. Dans ce qui suit, nous décrivons la méthode que nous avons développée pour modéliser les propriétés dynamiques des dislocations à partir du modèle de dislocations discrètes "coin-vis". Nous discutons d'abord la mise en place d'une dynamique, ce qui permet de définir une échelle de temps élémentaire. Deux mécanismes fondamentaux qui ne peuvent être traités de manière cohérente au niveau mésoscopique sont ensuite abordés, la formation des jonctions et le glissement dévié. Dans les deux cas, des règles simplifiées sont établies qui permettent de rendre compte de l'essence des phénomènes. Nous tirons ici avantage du fait que les propriétés plastiques macroscopiques ne sont sensibles qu'à un nombre limité de paramètres, ce qui permet de faire des approximations à l'échelle locale. La mise en place de la simulation numérique est enfin complétée par une description des conditions aux limites, des conditions initiales, des modes de sollicitation et des techniques d'analyse des résultats.

#### III-1. ÉQUATION DU MOUVEMENT

La réalisation d'une simulation des propriétés dynamiques d'un système physique contenant des objets en mouvement et en interaction nécessite l'intégration numérique d'un ensemble d'équations différentielles couplées décrivant l'évolution spatiale des positions de ces objets au cours du temps. Atteindre cet objectif dans le cas de la plasticité requiert l'établissement d'équations décrivant le mouvement des dislocations sous l'influence des forces de configuration et externes auxquelles elles sont soumises.

##### **A. Lois de mouvement**

De nombreuses lois ont été proposées afin de relier la vitesse de glissement des dislocations à la contrainte effective locale. On utilise souvent des expressions de la forme

$$v(\tau^*) = v_0 (\tau^*/\tau_0)^m \quad (23)$$

où  $\tau^*$  est la contrainte de cisaillement effective et  $v_0$  et  $\tau_0$  sont des constantes. Si au cours de la déformation plastique, la sensibilité à la vitesse définie par  $(d \ln \tau^* / d \ln \dot{\epsilon})$  reste constante, il en va de même pour  $m$ . A cette relation empirique, on peut préférer des expressions plus proches des phénomènes physiques qui gouvernent le mouvement. Généralement, dans les cristaux CFC, les dislocations adoptent un mouvement saccadé caractérisé par une succession de temps de vol et de temps d'attente. La vitesse moyenne d'une dislocation est donnée par,  $v = \lambda / (t_a + t_{vol})$ , où  $\lambda$  est la distance entre obstacles,  $t_a$  un temps d'attente et  $t_{vol}$  un temps de vol. Lorsque les temps d'attente sont prépondérants, la vitesse se met sous la forme d'une loi d'Arrhenius qui exprime le caractère thermiquement activé de la déformation plastique (Kocks *et al.* 1975, Cagnon 1979):

$$v(\tau^*) = v_0 \exp[-\Delta G(\tau^*)/kT] \quad (24)$$

où,  $v_0$ , est une constante,  $\Delta G(\tau^*)$ , l'énergie d'activation,  $k$  la constante de Boltzman et la température absolue,  $T$ . La notion d'activation thermique est alors corrélée à la définition d'un temps d'immobilisation des dislocations devant des obstacles localisés, inverse d'une probabilité de franchissement. L'équation (24) décrit assez bien le mouvement des dislocations à une échelle macroscopique. A plus faible échelle, comme dans notre cas, il est nécessaire de tenir compte également des temps de vol entre deux obstacles. Pour ces derniers, on définit alors une équation du mouvement newtonienne (Philibert 1979) représentant les mécanismes de freinage visqueux des dislocations dans le réseau cristallin.

$$v(\tau^*) = \tau^* b / B \quad (25)$$

où,  $B$ , est la constante de frottement visqueux. La dynamique se décompose donc en deux parties : d'une part le mouvement des segments dans un réseau parfait et d'autre part, le franchissement d'obstacles localisés, dont en particulier le glissement dévié et la montée. C'est par le biais de ces mécanismes que la température s'introduit dans la simulation.

## B. Dynamique du temps de vol

L'état des segments de dislocation est à tout instant caractérisé par leur position  $\mathbf{r}$  et leur vitesse  $\mathbf{v}$ . Les équations du mouvement se déduisent du principe fondamental de la Dynamique" ou deuxième Loi de Newton :

$$m(d\mathbf{v}/dt) = \tau^* b - B\mathbf{v} \quad (26)$$

où  $m$  est la masse équivalente de l'unité de ligne de dislocation. La force totale exercée sur chaque segment se décompose en deux parties :

- D'une part,  $\tau \cdot b$ , la force effective projetée dans la direction de déplacement définie au chapitre précédent. Cette force équivaut à une force motrice exercée par unité de longueur sur les segments.

- D'autre part,  $Bv$ , une force de freinage visqueux, dépendant de la température et représentant l'ensemble des processus dissipatifs tels que les interactions des dislocations avec les électrons ou les phonons. En première approximation, on se limite à une viscosité linéaire. Celle-ci est une force par unité de longueur, produit de la vitesse  $v$  des segments et d'un coefficient d'amortissement  $B$ , proportionnel à la "viscosité du milieu". Ainsi, comme le montre la figure 36, lors du fonctionnement d'une source de Frank-Read isolée, une partie importante du travail mécanique se transforme en chaleur. Aux premiers instants, la force appliquée augmente pour atteindre la contrainte d'instabilité de la source. Puis, un régime constant s'établit avec des oscillations à chaque fois qu'une boucle de dislocation générée par la source est éliminée aux limites du cristal.

Par analogie avec les effets de viscosité d'un gaz, une estimation de  $B$  peut être effectuée pour des matériaux modèles. A la température ordinaire,  $B$ , est de l'ordre de  $5 \cdot 10^{-5}$  Pa.s pour le cuivre et de  $10^{-4}$  Pa.s pour l'aluminium (Mosson 1968, Ferguson *et al.* 1967). En règle générale, les estimations théoriques de cette constante et ses mesures expérimentales concordent assez bien (Philibert 1979).

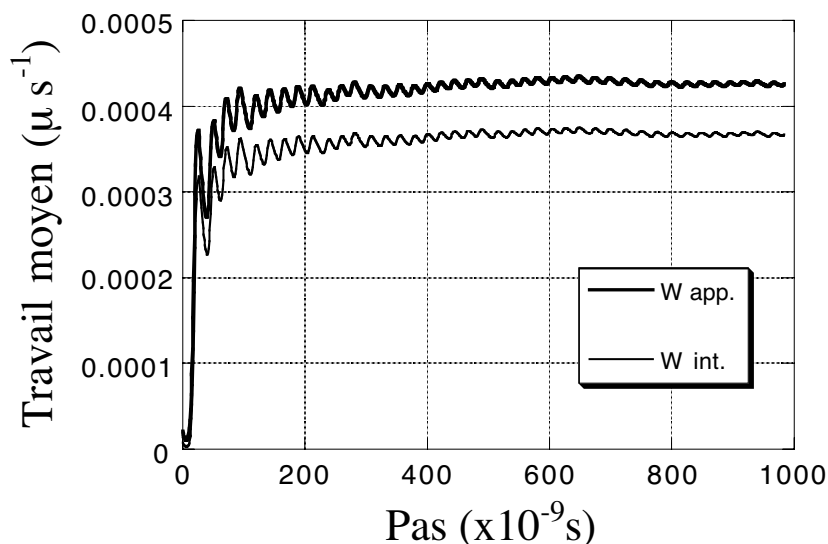


Fig. 36 : Variations du travail moyen d'une source de Frank-Read isolée en fonction du temps (simulation). Le travail mécanique de la force appliquée pour faire fonctionner la source est représenté en trait gras. Le travail interne réel des dislocations, c'est-à-dire le travail effectif dissipé par les segments au cours de leur déplacement est

représenté en trait fin. L'écart de 15% entre ces deux courbes est l'énergie élastique totale stockée dans le cristal sous forme d'énergie de ligne et d'interaction par unité de temps.

L'équation du mouvement (26) est similaire à l'équation de Langevin qui décrit le mouvement d'une particule dans un fluide visqueux.

L'intégration numérique du système d'équations couplées relatives à la dynamique d'un ensemble d'objets, quel qu'il soit, est un problème classique (Ermak *et al.* 1980, Allen et Tildesley 1991). Connaissant la vitesse et la position des particules à un instant  $t$ , on calcule l'état suivant du système à partir des deux équations :

$$\left| \begin{array}{l} \mathbf{r}(t + \delta t) = \mathbf{r}(t) + \delta t \cdot \mathbf{v}(t) \\ \mathbf{v}(t + \delta t) = \frac{\boldsymbol{\tau}^*(t) \cdot \mathbf{b}}{B} \end{array} \right. \quad (27)$$

Les intervalles de temps,  $\delta t$ , doivent être suffisamment petits pour que l'on puisse supposer que les forces restent constantes. Comme nous le montrons dans l'annexe II, l'influence des effets d'inertie peut être négligé dans ces expressions. Cette simplification est justifiée par la faible masse effective des dislocations (Weertman et Weertman 1980) et par l'amplitude que nous allons choisir pour le pas de temps,  $\delta t$ , de la simulation. On peut donc supposer que les dislocations se déplacent toujours en régime permanent.

### C. Détermination du pas de temps élémentaire

La détermination du pas de temps de la simulation,  $\delta t$ , résulte d'un choix à la fois crucial et délicat. Il faut vérifier que les résultats de la simulation sont indépendants du choix effectué. Par analogie avec les simulations à l'échelle atomique par la dynamique moléculaire, où  $\delta t$  est choisi égal à une fraction de l'inverse de la fréquence de Debye, une première estimation peut être faite, si l'on connaît le libre parcours moyen d'une dislocation. Cette distance est de l'ordre de  $\rho^{-1/2} = 1 \mu\text{m}$  pour une densité de dislocations de l'ordre de  $10^{12} \text{ m}^{-2}$ . Si l'on suppose la vitesse de glissement des dislocations faible devant la vitesse du son ( $v \sim 10 \text{ ms}^{-1}$ ), le temps caractéristique de libre parcours moyen est, en cours de déformation, de l'ordre de  $10^{-7} \text{ s}$ . Une fraction d'un centième de ce temps, représente alors une estimation raisonnable du pas d'intégration nécessaire pour résoudre convenablement les équations du mouvement.

En réalité, la nature du mouvement des dislocations est beaucoup plus complexe que ne le laisse entrevoir ce calcul simple. A chaque fois qu'un segment de dislocation est déplacé, il modifie la courbure de la ligne de dislocation et induit une variation locale

rapide de la tension de ligne d'autant plus forte que le pas en temps est grand, c'est à dire les déplacements importants. La résolution d'une dynamique des dislocations est en fait contrôlée par une variation nécessairement lente de la courbure des dislocations.

La figure 37, issue de nos simulations, montre que le spectre des vitesses instantanées des segments est extrêmement large. C'est pourquoi il faut borner supérieurement les vitesses afin d'éviter d'avoir de trop petits pas de temps et de trop fortes variations locales de courbure.

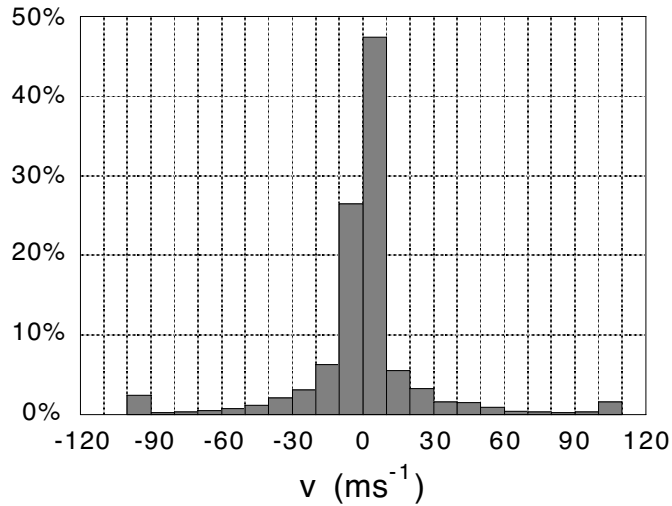


Fig. 37 : Histogramme de la vitesse instantanée des segments de dislocation pendant un pas de simulation. Une vitesse maximale instantanée de 100m/s est imposée aux segments les plus rapides pour éviter une variation trop rapide de la courbure locale des dislocations.

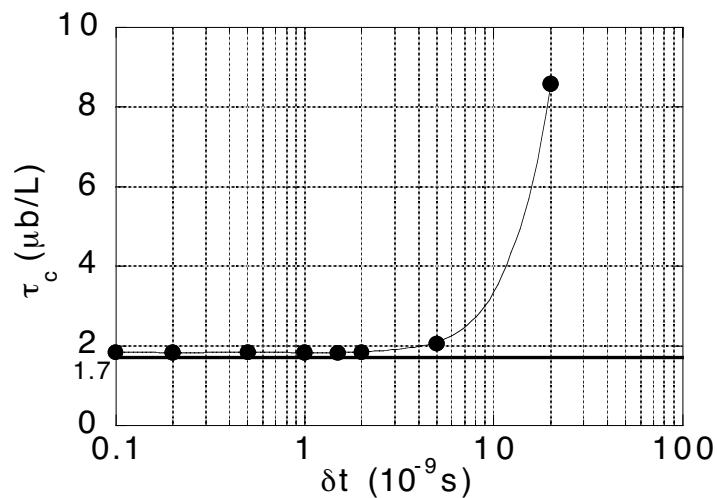


Fig. 38 : Variation de la contrainte critique d'écoulement d'une source de Frank-Read,  $\tau_c$ , en fonction du pas de temps de la simulation,  $\delta t$ . En trait épais est indiquée la solution exacte prédite par la théorie élastique.

En pratique, la valeur de  $\delta t$  se déduit directement de la simulation et le calcul de quelques quantités simples, à partir de la théorie élastique des dislocations, suffit à fixer le domaine de stabilité des solutions exactes.

Par exemple, la figure 38, reproduit les variations de,  $\tau_c$ , contrainte d'instabilité d'une source de Frank-Read, en fonction du pas de temps. Les solutions calculées avec une discrétisation constante de la ligne de dislocation s'accordent avec les prédictions de la théorie jusqu'à une valeur du pas de temps,  $\delta t \approx 2 \cdot 10^{-9}$  s. Au-delà d'une valeur,  $\delta t = 5 \cdot 10^{-9}$  s, les déplacements ne sont plus prédits convenablement et la simulation conduit à des contraintes critiques qui progressivement divergent. Par ailleurs, la résolution des équations du mouvement ne peut pas être effectuée mathématiquement de manière exacte, si les déplacements ne sont pas continus. Une surévaluation systématique d'environ 30% de la contrainte d'écoulement d'une source de Frank-Read est induite artificiellement par les déplacements discrets des segments de dislocation sur le réseau spatial de simulation défini au chapitre II. Cette erreur systématique est corrigée en calculant les équations du mouvement à chaque pas de simulation avec des coordonnées et des déplacements réels pour les dislocations. On arrondit ensuite, seulement pour le calcul des forces, ces coordonnées réelles par la position entière la plus proche sur le réseau discret. Cette procédure équivaut une fois encore à supposer les variations du champ de contrainte interne négligeables sur une distance élémentaire du réseau de simulation.

### III-2. RÉACTION ENTRE DISLOCATIONS

Lorsque plus d'un système de glissement est actif, la simulation doit traiter les intersections entre dislocations. Ces réactions à courte portée, absentes des simulations bi-dimensionnelles, contrôlent la limite élastique et les mécanismes de durcissement.

La modélisation de ces réactions suppose une recherche topologique des événements de rencontre entre lignes, et une gestion des différentes réactions possibles. Dans la simulation 3D, ce travail est simplifié par la nature discrète des lignes de dislocations : la recherche des obstacles dans l'aire de vol des dislocations mobiles se réduit à un simple calcul d'intersection entre des segments de droites et le plan de glissement.

Il existe 24 réactions possibles entre deux dislocations parfaites dans un cristal CFC. Friedel (1955) et Hirth (1961) ont montré que 12 de ces réactions conduisent à la formation de jonctions fortes. Les 12 restantes ne forment pas de jonction ou conduisent à des jonctions faibles. Toutes ces combinaisons sont résumées sur le tétraèdre de Thompson de la figure 39.



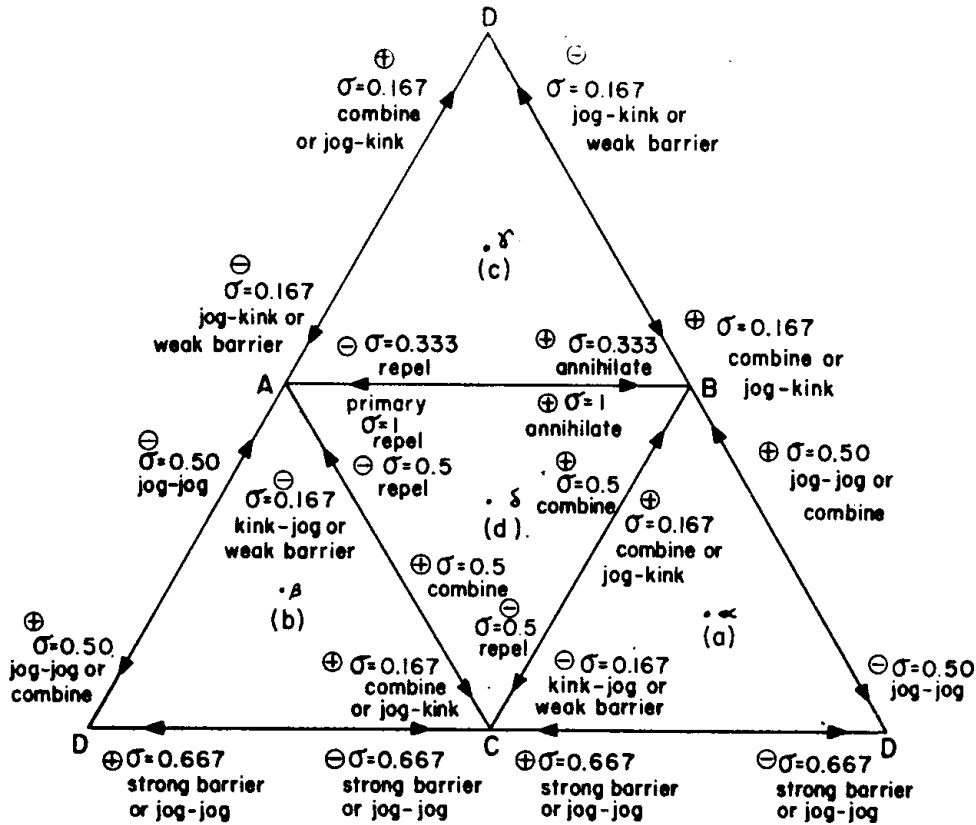


Fig. 39 : Illustration des 24 réactions possibles entre une dislocation parfaite BA(d) et les autres systèmes de glissement sur le tétraèdre de Thompson. Les signes (+) ou (-) désignent le caractère attractif ou répulsif à grande distance. La contrainte  $\sigma$  est définie comme une fraction de la cission projetée maximale dans le plan de glissement (Hirth 1961).

Géométriquement deux classes de réactions entre dislocations à courte distance peuvent être différenciées :

- les réactions coplanaires
- les réactions non-coplanaires

Les premières font intervenir des dislocations parfaites, glissiles et sont contrôlées par les énergies d'interaction élastique à grande distance. Les secondes peuvent créer des jonctions sessiles. Dans ce dernier cas il faut alors établir des règles particulières afin de décrire les mécanismes de formation et de destruction des produits de réaction.

### A. Réaction entre deux segments de dislocation coplanaires

Au rapprochement de deux dislocations répulsives s'oppose une contrainte d'interaction considérable à courte portée, typiquement plusieurs centaines de MPa, à une distance égale à une translation élémentaire. En complément, une règle de la simulation

interdit tout recouvrement de lignes de dislocations sur un même noeud du réseau, à l'exception des réactions d'annihilation ou de formation de jonctions.

Le cas des rencontres entre segments coplanaires attractifs est plus complexe. Lorsque ces segments ont le même vecteur de Burgers, ils doivent s'annihiler sur leur longueur de recouvrement. La difficulté consiste alors à maintenir entre les lignes de dislocations une règle de connectivité qui vérifie la condition de Frank (fig. 40).

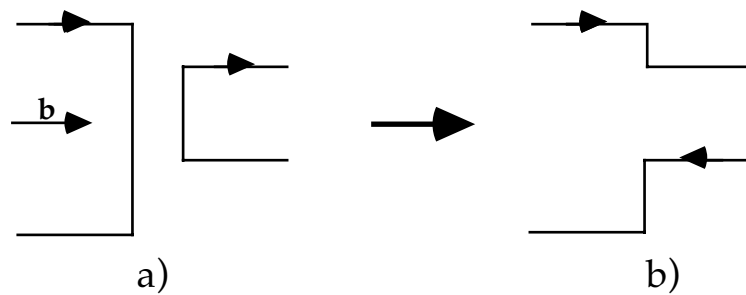


Fig. 40 : Représentation schématique du mécanisme discret d'annihilation. On illustre la transformation des lignes de dislocations (a) avant et (b) après réaction.

Les réactions entre dislocations attractives coplanaires mais de vecteur de Burgers différents mettent en jeu théoriquement une recombinaison des deux lignes pour former une nouvelle dislocation parfaite et glissile. Cette réaction, difficile à décrire sur un réseau rigide n'est pas représentée dans la simulation. Dans notre modèle, les segments attractifs forment spontanément une configuration stable qui minimise l'énergie d'interaction en adoptant une direction mixte commune correspondant à la direction de recombinaison réelle (cf. fig. 41). La stabilité de ces configurations est naturellement moins forte que dans la réalité. Cependant, cette simplification influence peu le réalisme des résultats, puisque les jonctions entre dislocations coplanaires ne contribuent pas significativement à l'écroutissage. De plus, la probabilité pour que deux dislocations de vecteur de Burgers différents soient positionnées dans un même plan de glissement est faible si le glissement dévié n'est pas très actif. Une description plus exacte de ces mécanismes devra cependant être proposée dans l'avenir afin de permettre l'étude des propriétés de restauration et de formation des sous-joints de dislocations aux températures moyennes et élevées.

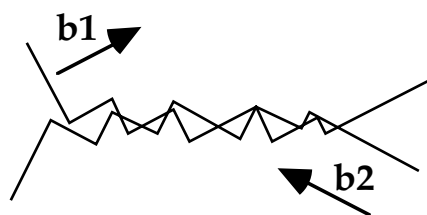


Fig. 41 : Illustration d'une jonction entre dislocations attractives coplanaires de différents vecteurs de Burgers  $b_1$  et  $b_2$ . La recombinaison des lignes de dislocation n'est

*pas effectuée par la simulation. La forme de la jonction résulte uniquement des interactions élastiques entre les deux lignes de dislocations.*

## **B. Réactions entre segments de dislocation non-coplanaires**

Dans le cas de segments attractifs, ces réactions forment des jonctions sessiles qui dépendent des énergies d'interaction à grande distance et de la variation locale de self-énergie des lignes après recombinaison. Elles font appel à des calculs élastiques trop complexes pour pouvoir être introduits dans la simulation, même de façon approchée (Saada 1960, Schoeck et Frydman 1972).

Dans une première étape, nous avons montré qu'il est possible de caractériser par une règle simple la condition de formation des jonctions fortes. On calcule la variation,  $\Delta U$ , de self-énergie associée à ces réactions pour des dislocations rectilignes infinies. Les effets d'interactions élastiques à grande distance sont négligés et seul est considéré le signe de l'équation bilan de la réaction, en ne prenant en compte que les énergies de ligne (de vecteurs de Burgers  $\mathbf{b}_1$  et  $\mathbf{b}_2$ ):

$$\Delta U = (\mathbf{b}_1^2 + \mathbf{b}_2^2 - (\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)^2) \quad (29)$$

Lorsque la différence d'énergie  $\Delta U$  est positive ou nulle, la formation d'une jonction est supposée énergiquement défavorable et la possibilité de franchissement des deux lignes n'est contrôlée que par les interactions élastiques à grande distance. La formation de crans de dimensions atomiques au cours de l'intersection n'est pas traitée par la simulation. Cette simplification nécessaire est justifiée par la faible influence des mécanismes de crans sur le glissement des lignes de dislocations, à l'exception des très basses températures (Friedel 1964, Duesbery et Richardson 1991).

Par contre, lorsque  $\Delta U$  est négative, il y a une forte interaction à courte distance et la formation d'une jonction sessile doit être prise en compte. De telles jonctions, par exemple le verrou de Lomer-Cotrell, sont essentielles pour décrire l'écroutissage en glissement multiple (cf. chapitre 1).

Cette règle semi-empirique (eq. 29), recouvre parfaitement les résultats du calcul de Hirth (1961). Elle est utilisée au cours de la simulation pour tester la formation d'une jonction entre segments de dislocations à chaque fois que deux lignes se rencontrent sur un même noeud du réseau.

Lorsque ce critère est vérifié, les réactions sont traitées de manière phénoménologique en deux étapes :

- la construction de la jonction, qui nécessite une description des dislocations sessiles,

- sa destruction qui nécessite la définition d'une force d'obstacle, c'est-à-dire d'un angle critique ou d'une contrainte critique.

Les dislocations sessiles étant absentes du modèle de ligne "coin-vis", seul les aspects 'ancrage' et 'obstacle' sont décrits dans la simulation. Deux segments en interaction énergétiquement favorable sont immobilisés à leur point d'intersection pour modéliser l'effet d'ancrage d'une jonction (fig. 42). L'interaction élastique entre les deux segments formant la jonction "fictive" n'est plus calculée. De même, les segments de dislocations latéraux interconnectés à la jonction ne peuvent plus franchir ce point d'ancrage fictif, puisque un tel déplacement équivaldrait géométriquement à une destruction du produit de réaction (fig. 43).

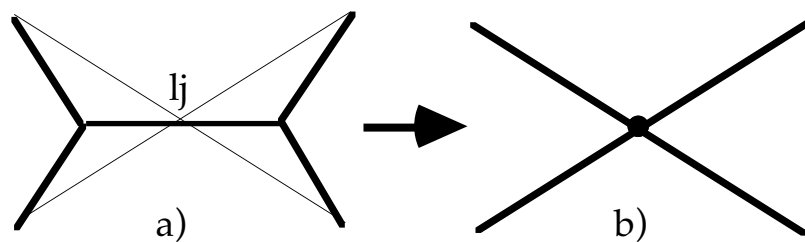


Fig. 42 a) Illustration de la forme théorique d'une jonction entre dislocations parfaites non-coplanaires.  $l_j$  est la longueur de jonction. b) Description de la même jonction avec les règles géométriques de la simulation. Le point d'intersection, marque le noeud d'ancrage des segments de dislocations qui forment la jonction.

La règle de destruction des jonctions, utilisée dans la simulation, dérive du modèle de la forêt (Friedel 1967). On considère qu'une jonction est détruite si la force effective totale exercée sur la ligne équivaut au gain d'énergie par unité de longueur lors de sa formation, soit  $\Delta U \sim \mu b^2$  par unité de longueur.

D'après le modèle de la forêt, si  $l_a = (\rho/2)^{-1/2}$  est la distance moyenne entre arbres attractifs, la longueur  $l_j$  des jonctions (cf. fig. 42) est de l'ordre de  $l_a/5$  dans des matériaux de structure CFC (Nabarro 1967). Cette estimation permet de déduire pour différentes géométries des jonctions, l'expression de la contrainte de destruction  $\tau_j$  donnée par Saada (1960) :

$$\tau_j = \frac{\mu b}{\beta l_a} \quad (29)$$

avec  $\beta$  de l'ordre de 3 à 4 et  $\tau_j$  de l'ordre de quelques MPa.

Durant une simulation, la longueur de jonction  $l_j$  n'a pas besoin d'être estimée car elle est définie par la longueur des segments ancrés. Celle-ci varie à chaque instant pour assurer les conditions d'équilibre des lignes de part et d'autre de la jonction (fig. 43). La difficulté consiste plutôt à définir l'énergie virtuelle,  $\Delta U$ , gagnée lors de l'étape de formation.

Par comparaison avec le modèle de la forêt, on suppose cette énergie fixée pour une longueur de jonction  $l_j=1\mu\text{m}$  donnée. Alors :

$$\Delta U = \tau_j b l_j = \alpha' \mu b^2 \quad (30)$$

Cette expression de  $\tau_j$  contient un paramètre ajustable,  $\alpha'$ , qui permet de modifier la variation d'énergie par unité de longueur associée aux jonctions en fonction du matériau considéré. Ce paramètre, est numériquement équivalent à l'angle critique de rupture des jonctions,  $\Phi_c$ , utilisé lors des simulations de type Foreman-Makin (cf. chapitre I).

En première approximation, on peut estimer l'énergie de jonction par unité de longueur,  $\Delta U$ , comme étant de l'ordre de la tension de ligne,  $T$ , exercée sur la jonction si le franchissement s'effectue par le mécanisme d'Orowan:

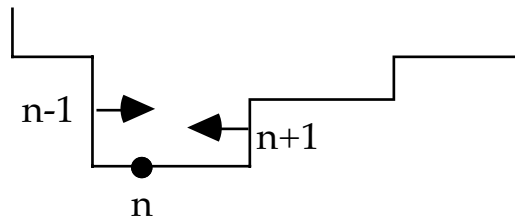
$$\tau_j = \frac{2T}{bl_j} = 2C \frac{\mu b}{l_j} \quad (31)$$

Cette hypothèse, équivaut à définir à partir des équation (18-bis) et (30), la constante de l'équation (30)  $\alpha' \sim 2C = 1.26$ . Ce calcul simple, n'intègre pas l'effet sur la destruction des jonctions des interactions élastiques à grande distance. Comme nous le montrons au paragraphe II-4, cette contribution est égale à environ 20% de la tension de ligne sur une source de Frank-Read isolée. Ainsi, en intégrant les effets de contrainte interne, la contrainte de destruction des jonctions est effectivement inférieure à celle nécessitée par un franchissement de type Orowan. En d'autres termes, les jonctions ne sont pas des obstacles infiniment forts.

Le raisonnement utilisé ici pour définir la force d'obstacle d'une jonction est approché. Son mérite est, cependant, de ne pas impliquer d'ajustement sur des valeurs expérimentales. Cette dernière approche a également été utilisée à titre de vérification. (Kubin et Devincere 1993). Le paramètre expérimental est la constante  $\alpha$ , reliant la contrainte d'écoulement à la racine carrée de la densité de dislocations de la forêt. Sans entrer ici dans le détail, nous nous contenterons de mentionner que la contrainte critique de destruction des jonctions ainsi obtenue est exactement la même que celle définie ci-dessus.

L'énergie d'une jonction ( $\approx \mu b^2$ ) étant grande devant l'énergie de vibration du réseau cristallin (0.1 eV), sa destruction n'est pas activée thermiquement aux températures basses

( $T < 0,4 T_{\text{fusion}}$ ). Enfin, notons que la règle adoptée pour la destruction des jonctions ne dépend que de la force exercée sur chacun des segments composant la jonction. Elle permet donc la description de configurations à  $N$  segments. En effet, le traitement appliqué lors de la formation ou de la destruction d'une jonction est indépendant du nombre de segments mis en jeu. Cette remarque est importante, car la longueur d'une jonction peut être grande à certains moments, rendant inévitable l'existence de réactions plus complexes que le cas idéal de deux segments isolés.



*Fig. 43 : Illustration de la courbure d'une ligne de dislocation dont le segment  $n$  forme une jonction avec une dislocation normale au plan de la feuille (point noir). Lorsque la force sur la jonction augmente, les segments  $n-1$  et  $n+1$  se déplacent pour modifier la courbure de la ligne réduisant ainsi la longueur du segment " $n$ " ancré à la jonction. Ce segment se décroche finalement de la jonction lorsque  $\tau_{\text{eff}} = \tau_j$ , avant que les deux segments latéraux ne se rejoignent au point d'ancrage pour libérer la ligne par le mécanisme d'Orowan.*

La description des réactions entre dislocations, telle qu'elle est définie dans la simulation est, par certains aspects, plus grossière que dans de nombreux modèles statiques de la littérature (Hirth et Lothe 1961, Saada 1960). Ces simplifications géométriques sont cependant indispensables pour permettre une modélisation dynamique de la formation et de la destruction d'une jonction entre dislocations en trois dimensions. Par ailleurs, d'un point de vue énergétique, notre description de la stabilité des jonctions, qui intègre à l'échelle locale les effets dynamiques d'une contrainte extérieure, sont certainement plus réalistes que tous les calculs élastiques disponibles dans la littérature.

### III-3. LE GLISSEMENT DÉVIÉ

La température n'est pas une variable explicite de la simulation. Nous avons vu au paragraphe III-1 que la viscosité du milieu est une grandeur physique dépendante de la température de déformation. Cependant, l'essentiel de la dépendance en température des propriétés mécaniques provient de mécanismes thermiquement activés comme la montée des coins et le glissement dévié des vis. Ces deux propriétés trouvent leur origine à l'échelle atomique (Duesbery et Richardson 1991). Elle ne peuvent donc pas être décrites exactement à l'échelle de notre simulation. Comme pour les mécanismes de formation des

jonctions sessiles, ces propriétés sont modélisées en considérant leurs effets moyens à l'échelle mésoscopique.

Notre étude se limitant aux propriétés plastiques des métaux à basse température et à des vitesses de déformation élevées, l'influence de la montée des dislocations peut, en l'état actuel, être négligée. En effet, dans de telles conditions, la contribution de ce mécanisme à la déformation est secondaire devant celle due au glissement des dislocations.

Par contre, le glissement dévié des dislocations vis intervient, même à basse température si la contrainte est suffisamment élevée, et doit compléter la liste des mécanismes élémentaires pris en compte. Physiquement, ce mécanisme joue un double rôle. Il permet l'annihilation des dislocations vis de signes opposés, se déplaçant dans des plans de glissement parallèles et il permet la relaxation de fortes contraintes internes locales ainsi que le franchissement d'obstacles dans le plan de glissement des dislocations.

Le modèle "coin-vis" ne prenant en compte que des dislocations parfaites est inadapté à une description des propriétés de coeur contrôlant le glissement dévié. Dans les matériaux de structure CFC, les dislocations ont tendance à se dissocier en partielles de Schoekley bordant un ruban de faute d'empilement. Les dislocations vis sont alors confinées dans leur plan de dissociation, qui peut ne pas coïncider avec le plan de glissement localement favorisé par les contraintes. Pour pouvoir glisser, la dislocation doit alors changer de plan. Les partielles se recombinent sur une certaine longueur imposant aux directions vis de la ligne l'adoption d'une configuration d'énergie plus élevée. Ce mécanisme de constriction des partielles implique le franchissement d'une barrière d'énergie (Friedel 1964, Escaig 1967, 1968).

Afin de décrire ce mécanisme à l'échelle mésoscopique, nous le décomposons de manière phénoménologique en trois étapes successives:

- En premier lieu, avant de changer de plan de glissement, une dislocation doit s'immobiliser sous l'effet d'une contrainte interne,  $\tau_{int}$ , opposée au sens du mouvement dans le plan de glissement. Cette condition s'exprime par:

$$\tau_{app} \cdot \tau_{int} < 0 \quad (32-a)$$

- Cette condition vérifiée, la probabilité de déviation peut être introduite. Cette quantité dépend de la température, de la largeur de dissociation, c'est-à-dire de l'énergie de faute d'empilement du matériau et de l'orientation cristallographique du plan de glissement par rapport à l'axe de traction.

Nous avons résumé ces trois influences à l'aide d'une équation stochastique phénoménologique (Kubin *et al.* 1992):

$$P = A \left( \frac{l}{l_0} \right) \delta t \exp \left( \frac{\tau_{int} - \tau_{III}}{S} \right) \quad (32-b)$$

Cette expression définit la probabilité,  $P$ , pour un segment vis de changer de plan de glissement pendant un intervalle de temps,  $\delta t$ , sous une contrainte interne locale,  $\tau_{int}$ . Cette probabilité est proportionnelle à la longueur du segment,  $l$ , en unités réduites ( $l_0=1 \mu\text{m}$ ). On élimine ainsi le glissement dévié des segments de longueur insuffisante pour pouvoir se déplacer dans le plan dévié et on favorise les grands segments le long desquels la probabilité d'apparition d'un pincement des partielles, initiateur de la constriction de la ligne de dislocation, est plus importante (Vanderschaeve et Escaig 1979). D'autre part,  $\tau_{III}$  est la cission critique qui marque le début du stade III sur la courbe contrainte-déformation des monocristaux CFC,  $S=kT/V$  est la sensibilité à la vitesse et  $V$  le volume d'activation associé au glissement dévié. Dans le cuivre et à 300 K,  $V \approx 300b^3$  (Bonneville, Escaig et Martin 1988).

Le sens physique de cette expression est le suivant. Le début du stade III marque un changement des propriétés mécaniques et de l'arrangement de la microstructure qui est lié à l'apparition du glissement dévié. Nous faisons donc l'hypothèse que lorsque la contrainte interne locale atteint la valeur  $\tau_{III}$ , la probabilité locale de glissement dévié devient forte. L'influence de la nature du matériau, via son énergie de faute d'empilement ou sa largeur de dissociation, est ainsi prise en compte à un niveau mésoscopique. On vérifie ainsi à partir du tableau 2 que l'introduction du  $\tau_{III}$  comme paramètre de la simulation permet de rendre compte de manière indirecte de la structure de coeur.

	Cu	Al
$\gamma$ (mJ/m <sup>2</sup> )	45 ±9	135±27
$\tau_{III}$ (MPa)	~28	~5

Tableau 2 : Valeurs de l'énergie de défaut d'empilement et de la contrainte au début du stade III,  $\tau_{III}$ , pour le cuivre et l'aluminium (Éléments de métallurgie physique 1991).

Dans l'expression (32-b), la constante,  $A$ , normalise la probabilité de glissement dévié par pas de simulation sur la base d'arguments dimensionnels. On suppose que la probabilité  $P$  est égale à un pour un segment de longueur  $l_0$  au bout d'un temps d'attente  $t_a=10^{-2}\text{s}$  si  $\tau_{int}=\tau_{III}$ . On en déduit  $P=At_a=1$  d'où  $A=10^2\text{s}^{-1}$ .

La probabilité de glissement dévié par unité de temps est donc proportionnelle à la vitesse de relaxation de  $\tau_{int}$ . Cette expression locale est proche de l'équation globale



proposée par Friedel (1964 p. 277) pour décrire la vitesse moyenne de restauration statique à basse température. Au cours de ce mécanisme de relaxation, le glissement dévié est induit par la contrainte interne moyenne qui, en retour, réduit le glissement dévié à un taux donné par :

$$\frac{\partial \sigma_{\text{int}}}{\partial t} = -K \exp\left(\frac{U_{\text{gd}}(\sigma_{\text{int}})}{kT}\right) \quad (33)$$

$K$  est une constante et  $U_{\text{gd}}$  est l'énergie d'activation du glissement dévié qui décroît au fur et à mesure de l'écroutissage du matériau. En développant au premier ordre l'énergie d'activation, on peut intégrer l'expression (33). Conformément à l'expérience, une relaxation de la contrainte interne en  $\log(t)$  est obtenue. De fait, les simulations de Barioz (1991) montrent, dans le cas de l'aluminium, que la loi locale (33) permet bien de reproduire à l'échelle macroscopique une telle loi de restauration statique.

• Enfin, le calcul de la position de col d'énergie dans les modèles de glissement dévié fait nécessairement intervenir les contraintes dans le plan de déviation (Escaig, 1967, 1968, Bonneville, Escaig et Martin 1988). Ici encore nous nous contentons d'une formulation simplifiée. Le critère retenu tend à faciliter la déviation pour des dislocations vis peu dissociées. L'expression correspondante exprime que le rapport des contraintes effectives dans le plan de glissement primaire et dans le plan de déviation doit être supérieur à une valeur critique:

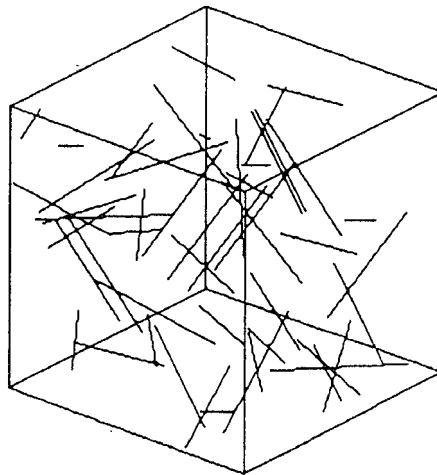
$$\frac{\tau_{\text{dévié}}}{\tau_{\text{primaire}}} > \chi \quad (32-c)$$

Pour l'aluminium, la valeur de  $\chi$  doit être proche de 1 ( $\chi_{\text{Al}} = 1,1$  dans la simulation). Pour le cuivre, un calcul élastique approché, basé sur la distance critique d'annihilation de deux dislocations vis (Essmann et Mughrabi 1979), donne  $\chi_{\text{Cu}} \approx 1,6$ . Dans tous les cas, le glissement dévié des vis n'est autorisé que si la contrainte effective projetée dans le plan dévié est plus grande que celle dans le plan de glissement. Il faut noter, enfin, que cette règle s'applique quel que soit le plan de glissement initial, primaire ou dévié.

A l'aide des trois règles phénoménologiques (32 a-b-c), la simulation prend en compte le caractère thermiquement activé du glissement dévié et les propriétés du matériau, plus particulièrement la largeur de dissociation des dislocations vis. Ainsi, ce sont les mécanismes essentiels de restauration statique et d'annihilation des dislocations vis qui sont ainsi décrits.

### III-4. CONDITIONS INITIALES

Le modèle discret "coin-vis" ne contient que des segments glissiles. Il est donc insuffisant pour décrire complètement le réseau de Frank d'un matériau recuit. Celui-ci est, en effet, constitué d'un ensemble de segments de dislocation glissiles et sessiles, interconnectés à trois dimensions et en équilibre à leurs noeuds triples.



*Fig. 44: Conditions initiales de la simulation. Une distribution aléatoire de segments de dislocation rectilignes, ancres à leurs extrémités, représente les parties glissiles du réseau de Frank.*

Les configurations initiales (fig. 44) de la simulation sont constituées d'une distribution aléatoire de segments glissiles et de même longueur. Ces segments sont ancres à leur extrémités et se comportent en présence d'une contrainte appliquée comme autant de sources de Frank-Read. Une telle configuration peut être considérée comme un sous-ensemble du réseau de Frank d'où on a retiré les parties sessiles.

Si,  $\rho$ , est la densité initiale de dislocations, la longueur moyenne qui leur est attribuée est  $L = \rho^{-1/2}$ . La constante,  $p$  ( $p > 1$ ), est introduite afin que ce soit la propagation des dislocations à travers les obstacles de la forêt qui contrôle la limite élastique et non pas la contrainte de Frank-Read des sources initiales. Cette condition s'exprime sous la forme de l'inégalité :

$$\begin{array}{ccc} \tau_c \approx \alpha \cdot \mu b / \rho^{-1/2} & > & \tau_{\text{source}} \approx \mu b / L, \\ \text{ou} & & 1/\alpha < p \end{array} \quad (34)$$

avec  $\tau_c$  la contrainte d'écoulement et  $\tau_{\text{source}}$  la contrainte critique d'instabilité d'une source de longueur  $L$ ,  $\alpha$  est la constante phénoménologique discutée en § I-1 ( $\alpha \approx 0.3$  pour les CFC). Il faut donc avoir  $p \geq 3$  afin que la limite élastique soit contrôlée par le mécanisme de la forêt.

Cette condition sur la distribution initiale des dislocations a été testée sur les simulations. Si la longueur initiale des sources est petite ( $p \approx 1$ ), le régime de déformation plastique reproduit par notre modèle est irréaliste. La limite élastique est trop élevée et elle correspond à la contrainte critique de multiplication des sources. Aucun durcissement plastique ne peut plus être observé puisque les dislocations mobiles ne sont ancrées ni par la forêt ni par les interactions élastiques à grande distance. Rapidement, un régime de déformation plastique uniforme s'établit et la densité totale de dislocations reste constante au cours du temps.

Cet artefact des conditions initiales de la simulation illustre un aspect essentiel de la plasticité. La déformation est très sensible à l'histoire du matériau avant déformation. Dans la réalité, la sous-structure initiale de dislocations est toujours suffisamment hétérogène pour que la condition imposée à la simulation soit toujours vérifiée. Dans notre cas, la distribution des longueurs des segments sources est homogène et la densité initiale de dislocations est identique sur tous les systèmes de glissement. Cependant l'hétérogénéité spatiale apparaît après que les premières interactions entre dislocations mobiles et arbres de la forêt aient eu lieu

Un autre type de configuration initiale envisagé pour nos simulations, qui élimine la difficulté mentionnée plus haut, consisterait à prendre une distribution aléatoire de sources à un seul point d'ancrage (sources spirales), l'autre extrémité émergeant en surface. Une telle configuration, certes moins réaliste que la première, offre l'avantage de réduire de moitié le nombre de points d'ancrage des lignes de dislocation initialement présent dans le volume. L'influence de telles conditions initiales n'a cependant pu être testée faute de temps.

Enfin, une dislocation vis parfaite n'a pas de plan de glissement défini dans un continuum élastique. En réalité, la dissociation se fait toujours dans un plan compact, le plan de glissement. Ceci est pris en compte au premier pas de simulation par un choix aléatoire du plan de glissement et du plan de glissement dévié.

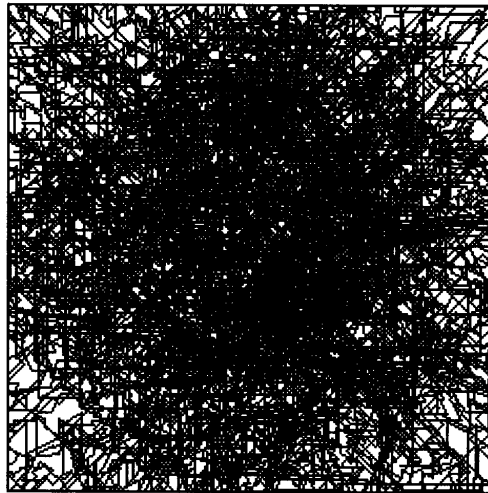
### III-5. CONDITIONS AUX LIMITES

Au cours des simulations à deux dimensions la géométrie du système étudié (dislocations rectilignes, infinies et parallèles) permet de construire des conditions aux limites périodiques ou d'imposer une condition de fermeture des plans de glissement sur eux-mêmes : lorsqu'un segment atteint une limite de l'aire de simulation, une réplique de celui-ci est introduite sur le côté opposé de manière à maintenir un flux total nul aux limites.

La réalisation de conditions équivalentes à trois dimensions et pour des structures cristallines contenant plus de trois systèmes de glissement indépendants est un problème géométrique complexe. Par exemple, il n'existe pas de solution satisfaisante pour la fermeture des plans de glissement (111) d'un CFC avec une boîte de simulation cubique.

Pour maintenir un flux moyen nul aux limites de la simulation et limiter l'influence des surfaces, il a été envisagé dans un premier temps de réintroduire les dislocations sortantes de façon aléatoire. Cependant, une telle procédure, peut se révéler nocive car elle tend à contrarier l'hétérogénéité naturelle de la déformation plastique. En définitive, deux solutions sont apparues réalisables en pratique:

- La première, celle adoptée à l'heure actuelle, consiste à supposer la taille des éléments de volume simulés (de 15 à 30  $\mu\text{m}^3$ ) suffisamment grande pour que l'on puisse les assimiler à des microcristaux à bords libres. Dans ce cas, le traitement de la force image (cf. chapitre II), qui néglige l'effet à grande distance des surfaces pour se restreindre à une force de contact, est favorable. Cette procédure réduit la taille des régions fortement influencées par la force image et favorise les propriétés plastiques en volume (fig. 45).



*Fig. 45 : Vue instantanée de la boîte de simulation dans une direction [001]. Dans cette direction l'épaisseur de la boîte de simulation est constante, la densité est plus faible près des bords libres sous l'effet des annihilations en surface.*

- Une deuxième solution, qui devrait être développée dans l'avenir consiste à modéliser un grain d'un polycristal, en imposant des contraintes de surface. L'existence de ces contraintes, matérialisées ou non par la présence de dislocations d'interface, permettrait avantageusement de limiter les pertes en dislocations aux bords libres.

### III-6. CALCUL DE LA DÉFORMATION ET CONDITIONS DE SOLLICITATIONS

Le glissement des lignes de dislocation est à l'origine de la déformation plastique. Connaissant le déplacement microscopique des dislocations, il est possible d'en déduire la déformation plastique macroscopique de l'élément de volume considéré. Ce calcul est un exercice classique de la théorie des dislocations (Hirth et Lothe 1968). A chaque pas de simulation, on calcule l'aire balayée par les segments de dislocations dans leur plan de glissement. Cette quantité est reliée au cisaillement simple,  $\gamma$ , de chaque segment  $n$ . Afin de déterminer le tenseur de déformation total, on déduit de  $\gamma$  le tenseur de déformation associé  $\varepsilon_{ij}^*$ . Celui-ci s'exprime dans un repère normé privilégié  $\{\beta, \mathbf{n}, \mathbf{p}\}$ , avec:

$$\left| \begin{array}{l} \beta : \text{direction du cisaillement ( // } \mathbf{b} \text{)} \\ \mathbf{n} : \text{normale au plan de glissement} \\ \mathbf{p} : \text{vecteur complémentaire direct à } \beta \text{ et } \mathbf{n} \end{array} \right.$$

et

$$\varepsilon_{ij}^* = \frac{\gamma}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (35)$$

Enfin, on somme dans un même repère macroscopique chaque fraction de déformation plastique,  $\varepsilon_{ij}^*$ , pour déterminer la déformation totale de l'élément de volume considéré :

$$\varepsilon_{ij}^{\text{plas. macro}} = \sum_n T_{ik}^{(n)} T_{jl}^{(n)} \varepsilon_{kl}^{*(n)} \quad \text{et} \quad T_{ij} = \begin{pmatrix} \beta_1 & n_1 & p_1 \\ \beta_2 & n_2 & p_2 \\ \beta_3 & n_3 & p_3 \end{pmatrix}. \quad (36)$$

On néglige ici la rotation d'ensemble associée, car la déformation totale atteinte en fin de simulation est faible ( $\varepsilon^{\text{tot}} < 1\%$ ).

#### *Conditions de sollicitation*

Par construction, la solution numérique la plus simple, consiste à étudier la déformation plastique à contrainte ou vitesse de chargement imposées. Malheureusement, ces deux modes de sollicitation ne sont pas couramment utilisés à basse température. En pratique, les essais de laboratoire sont le plus souvent réalisés à vitesse de traverse constante, ce qui fixe la vitesse de déformation macroscopique totale.

La déformation plastique n'est pas continue dans le temps et les instabilités microscopiques sont compensées par la déformation élastique de l'échantillon et de la

machine de traction. On définit alors, un module élastique équivalent,  $M$ , qui incorpore les propriétés élastiques de la machine de traction, du montage et de l'échantillon.

$$\varepsilon_{\text{élas}} = \frac{\sigma_{\text{tot}}}{M} \quad (37)$$

Ce transfert mécanique entre déformation plastique et déformations élastique doit être reproduit dans les simulations, afin de contrôler à chaque instant l'écart entre déformation totale imposée et déformation plastique effective réalisées par les dislocations. Soit,  $\varepsilon_{\text{tot}}$  la déformation totale du microcristal :

$$\varepsilon_{\text{tot}} = \varepsilon_{\text{élas}} + \varepsilon_{\text{plas}} \quad \text{et} \quad \varepsilon_{\text{tot}} = \varepsilon_{\text{élas}} + \varepsilon_{\text{plas}} \quad (38)$$

on détermine à partir de l'équation (37) :

$$\varepsilon_{\text{élas}} = \frac{\sigma_{\text{tot}}}{M} \quad \text{et} \quad \frac{\sigma_{\text{tot}}}{M} = (\varepsilon_{\text{tot}} - \varepsilon_{\text{plas}}) \quad (39)$$

La condition de vitesse de déformation imposée,  $\dot{\varepsilon}_{\text{tot}} = \text{cste}$ , est satisfaite si, à chaque pas de la simulation, on incrémente la contrainte de:

$$\delta\sigma_{\text{tot}} = M(\dot{\varepsilon}_{\text{tot}} - \dot{\varepsilon}_{\text{plas}})\delta t. \quad (40)$$

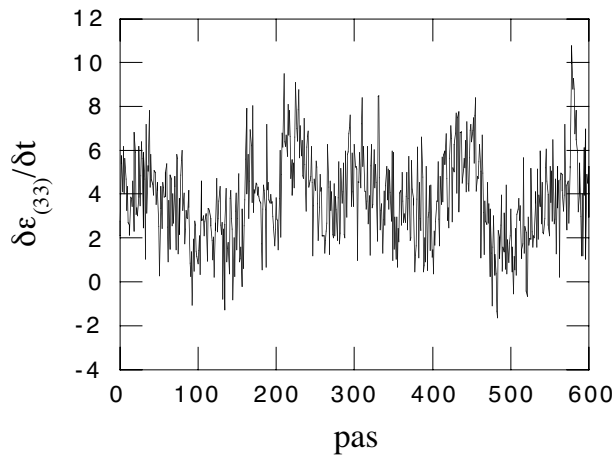


Fig. 46 : Variations instantanées de la vitesse de déformation au cours des pas de temps  $\delta t$  ( $2 \cdot 10^{-9}s$ ) d'une simulation de la déformation plastique à vitesse de déformation macroscopique constante,  $d\varepsilon/dt=5 \text{ s}^{-1}$ .

Cependant, il faut souligner, que la forte discrétisation des lignes de dislocation du modèle "coin-vis" implique au cours du temps des variations instantanées de la déformation plastique très fortes (fig. 46). C'est pourquoi, l'équation de régulation (40) de la simulation ne peut être utilisée que sur des valeurs de la déformation plastique moyennées sur une dizaine de pas de simulation.

Au cours de nos calculs, nous avons toujours supposé  $M$  de l'ordre de  $\mu$ , module de cisaillement du matériau étudié. Cette convention équivaut à la réalisation expérimentale d'une machine de traction dure, presque parfaite. Elle définit une raideur élastique apparente très élevée, de l'ordre du module d'Young, qui accélère la réponse plastique du matériau à une variation instantanée de la déformation totale.

Il peut être parfois intéressant d'étudier la formation d'une microstructure de dislocations en régime permanent. On utilise alors des conditions de sollicitation cyclique. simplifiées, telles celles de la figure 47.

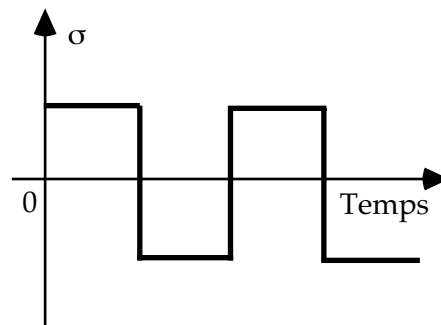


Fig. 47: Variations de la contrainte appliquée utilisée lors des simulations en conditions de sollicitation cyclique.

Pour avoir accès à un domaine de déformation le plus grand possible et compte tenu des échelles de temps accessibles à notre simulation ( $\approx 10\mu\text{s}$ ), il est indispensable d'imposer une vitesse de déformation la plus importante possible. Le domaine physique auquel nous nous intéressons est celui des vitesses dites "statiques" comprises entre  $10^{-5}\text{s}^{-1}$  et  $10^2\text{s}^{-1}$  (Gil Sevillano 1993), la borne supérieure se situant à la limite du régime dynamique.

En pratique, nous utilisons des vitesses de déformation comprises entre 1 et  $50\text{ s}^{-1}$ , et cela impose une condition importante sur les densités de dislocations initiales. Il faut en effet vérifier que la densité choisie est suffisante pour fournir la déformation plastique imposée dans un domaine de vitesse des dislocations ne se situant pas dans le régime dynamique. Lorsque cette condition n'est plus satisfaite, la contrainte appliquée devient supérieure à la résistance au glissement et aux contraintes internes. Un écrantage dynamique s'instaure alors et les dislocations se comportent comme des objets

individuels. Aucune microstructure ne peut plus se former et la densité de dislocations reste constante au cours de la déformation.

La densité minimale nécessaire, peut être déduite par un calcul approché à partir de la formule d'Orowan :

$$\varepsilon = \rho_m b \langle v \rangle \quad (41)$$

ou  $\rho_m$  et  $\langle v \rangle$  sont respectivement la densité et la vitesse moyenne des dislocations mobiles. Expérimentalement, ces quantités sont de l'ordre de  $\rho_m \approx 0.1\rho$  et  $\langle v \rangle \approx 1\text{m/s}$ . Pour une vitesse de déformation de  $10\text{ s}^{-1}$ , la densité initiale doit être d'au moins  $\rho \approx 4.10^{11}\text{ m}^{-2}$ .

### III-7. OUTILS D'ANALYSE DE LA SIMULATION

Contrairement au cas des simulations à l'échelle atomique, les résultats de nos simulations ne sont pas étayées par une théorie statistique. On peut cependant distinguer deux niveaux différents d'interprétation :

- D'une part, on peut s'intéresser aux grandeurs macroscopiques intégrées sur toutes les dislocations et sur le temps. Ces quantités moyennes sont directement comparables aux mesures de propriétés mécaniques de monocristaux. On détermine ainsi les variations des composantes des tenseurs de déformation totale, élastique et plastique, l'évolution de la densité de dislocations totale et de ses fractions mobile et immobile avec le temps ou la déformation.

L'énergie élastique stockée dans la boîte de simulation est calculée à partir de la différence entre puissance injectée,  $\sum_t W_{\text{app}} \delta t$  et puissance dissipée  $\sum_t W_{\text{int}} \delta t$ , ces deux quantités étant calculées à partir des expressions :

$$W_{\text{app}} = \frac{1}{V} \sum_n \tau_{\text{app}} b \delta A^{(n)} \quad \text{et} \quad W_{\text{int}} = -\frac{1}{V} \sum_n B v^{(n)} \delta A^{(n)}. \quad (42)$$

avec  $V$  le volume total de la boîte de simulation et  $\tau_{\text{app}} b$  la force appliquée projetée dans le plan de glissement. De même,  $v^{(n)}$  et  $\delta A^{(n)}$ , sont respectivement la vitesse et l'aire balayée par les segments "n" par pas de la simulation  $\delta t$ .

- D'autre part, il est possible de définir des observables instantanées, caractérisant la distribution spatiale des dislocations à l'intérieur du volume simulé. On utilise alors les outils classiques que sont dans l'espace direct la fonction de corrélation de paires  $g(r_x, r_y)$  et dans l'espace réciproque le facteur de structure  $S(k_x, k_y)$ . Ces fonctions sont ici réduites



à deux dimensions pour définir sans équivoque la position dans l'espace d'un segment de dislocation. Les coordonnées sont définies par un point à l'intersection de la ligne et d'un plan de coupe choisi à bon escient. De même, des cartographies du champ de contrainte interne peuvent être tracées en fonction du temps dans divers plans de coupe du cristal simulé.

Finalement, une méthode d'analyse performante des résultats de la simulation est l'observation directe de la dynamique des dislocations au cours de la déformation. Dans un sens, cette méthode revient à reproduire par simulation les techniques d'observation de la microscopie électronique. A cette fin, une interface graphique a été développée par M. Condat. Elle permet de visualiser "in situ" la distribution spatiale en 3D des dislocations d'après les positions calculées par le code de simulation. Cet outil de "microscopie numérique" permet de choisir à volonté l'orientation cristallographique d'observation de la boîte de simulation pour mettre en évidence les directions privilégiées des sous-structures, soit en volume, soit en lame mince. De même, un code de couleurs approprié permet une caractérisation spatiale rapide de tel ou tel sous-ensemble des dislocations (par système de glissement, par caractère, par ensemble de dislocations mobiles ou immobiles, etc...).



# CHAPITRE IV

## ÉCOULEMENT PLASTIQUE “LAMINAIRE”



## IV. ÉCOULEMENT PLASTIQUE "LAMINAIRE"

Dans les chapitres II et III, nous avons décrit et validé une nouvelle méthode de simulation de la dynamique des dislocations. L'élaboration de cet outil terminée, nous pouvons maintenant aborder l'étude du mouvement collectif des dislocations et de la déformation plastique. Nous commençons par examiner le cas simple d'un écoulement plastique "laminaire" (Cottrell 1953). Par analogie avec le problème posé par Holt ou avec le modèle de Taylor, nous considérons une population de dislocations rectilignes infinies de même vecteur de Burgers et de caractère coin. Ces dislocations sont parallèles entre elles et ont même direction de glissement. Ce modèle à deux dimensions est conceptuellement intéressant car il permet d'éliminer par construction les propriétés de contact entre dislocations, pour ne retenir que les interactions élastiques.

Bien que présentant des similitudes avec le mode de glissement facile des monocristaux, la situation examinée est trop simplifiée pour être comparée directement à l'expérience. Cependant, il est apparu récemment (Goriatchev 1993) que l'étude de situations idéalisées pouvait avoir une utilité. Elle peut permettre de tester des hypothèses générales dans des situations simples, par exemple l'éventuel caractère diffusif associé à la propagation de la déformation ou la nature des termes devant intervenir dans un modèle de réaction-diffusion, aussi bien que certaines prédictions d'un tel modèle.

A ce jour les simulations bi-dimensionnelles ont laissé en suspens des questions importantes (cf. Chapitre I-4).

- Au cours des simulations à 2-D se forme-t'il réellement des microstructures auto-organisées, ou les résultats obtenus à ce jour sont-ils des sous-produits des conditions aux limites ou de l'utilisation d'un rayon de coupure pour les interactions élastiques entre dislocations ?

- Quels sont les mécanismes élémentaires à l'origine de l'émergence de ces microstructures ?

- Les microstructures formées ont-elles une quelconque analogie de comportement avec celles observées expérimentalement ?

Dans le présent chapitre, nous tentons de répondre à ces trois questions.

### IV-1. CONDITIONS DE SIMULATION

La technique de simulation utilisée découle de la méthode générale tridimensionnelle présentée aux chapitres précédents. Les dislocations introduites sont de caractère coin avec un vecteur de Burgers  $\pm \mathbf{b}$  parallèle à la direction  $[1\bar{1}0]$ . Elles sont

mobiles sur des plans (111). L'espace est discrétisé par un réseau de simulation CFC de deux manières différentes: - soit on considère un cristal cubique de 8000 cellules ( $20 \mu\text{m}$ ) de côté orienté dans l'espace dans les directions  $[111]$ ,  $[1\bar{1}0]$  et  $[\bar{1}\bar{1}2]$ , les segments coins s'étendant d'un bord libre  $[\bar{1}\bar{1}2]$  à l'autre, - soit on considère une section plane  $[\bar{1}\bar{1}2]$ , perpendiculaire à la direction coin, de  $8000 \times 8000$  cellules ( $\approx 400 \mu\text{m}^2$ ), les contraintes d'interaction étant alors celles de dislocations infinies. Pourvu que les dimensions du cristal cubique soient suffisamment grandes, les résultats obtenus sont identiques dans les deux cas et nous décrivons ici ceux issus de la seconde méthode.

La résolution des équations du mouvement a été effectuée comme indiqué au Chapitre III-2, c'est à dire à partir du calcul direct des forces. Nous avons également testé une seconde procédure (Devincre et Pontikis 1993) qui consiste à effectuer à chaque pas de la simulation le calcul des énergies d'interactions élastiques entre dislocations rectilignes infinies (Hirth et Lothe 1982), quantités dont nous nous servons par la suite, puis les gradients dont nous déduisons les forces. Nous avons vérifié que les déplacements obtenus étaient identiques dans les deux cas.

Gulluoglu et al. (1989) ayant montré que l'emploi d'un rayon de coupure lors du calcul des interactions élastiques favorise l'émergence de structures artificielles (cf. Chapitre I-4), nous avons tenu compte de toutes les interactions, sans introduire de troncature. Ce choix interdit l'emploi de conditions aux limites périodiques afin de maintenir constante la densité de dislocations dans l'aire de simulation. En effet, il faut dans ce cas introduire une coupure afin d'écranter les interactions entre dislocations images engendrées par les conditions aux limites (Ghoniem 1990). Nous avons donc choisi d'utiliser des conditions aux limites "rigides", dans lesquelles une dislocation ne peut franchir les bords de l'aire simulée. L'influence de ces conditions est alors négligeable pourvu que le déplacement total de chaque dislocation reste faible devant la distance maximale de glissement,  $20\mu\text{m}$ . Ce critère est toujours vérifié lors de la relaxation d'une configuration sans contrainte appliquée. Une solution simple pour minimiser les distances parcourues en présence de forces appliquées consiste à imposer des conditions de sollicitation cyclique.

La distribution initiale de dislocations est uniforme (fig. 48). Une condition de neutralité totale des vecteurs de Burgers est imposée pour minimiser le champ de contrainte interne. La densité de dislocations peut être modifiée d'un essai à l'autre, soit en faisant varier le nombre de dislocations dans l'aire simulée, soit en modifiant l'aire simulée à nombre de dislocations constant. Les réactions d'annihilation sont exclues en pratique car, compte tenu des densités choisies et de la dimension de l'aire simulée, il n'y a pas en général plus d'une seule dislocation par plan de glissement. Ces conditions initiales définissent une distribution spatiale de dislocations éloignée de l'équilibre et qui ne peut abaisser son énergie élastique que par une réorganisation spatiale lors du glissement.

## IV-2. RÉSULTATS

### A. Microstructures relaxées et dynamiques

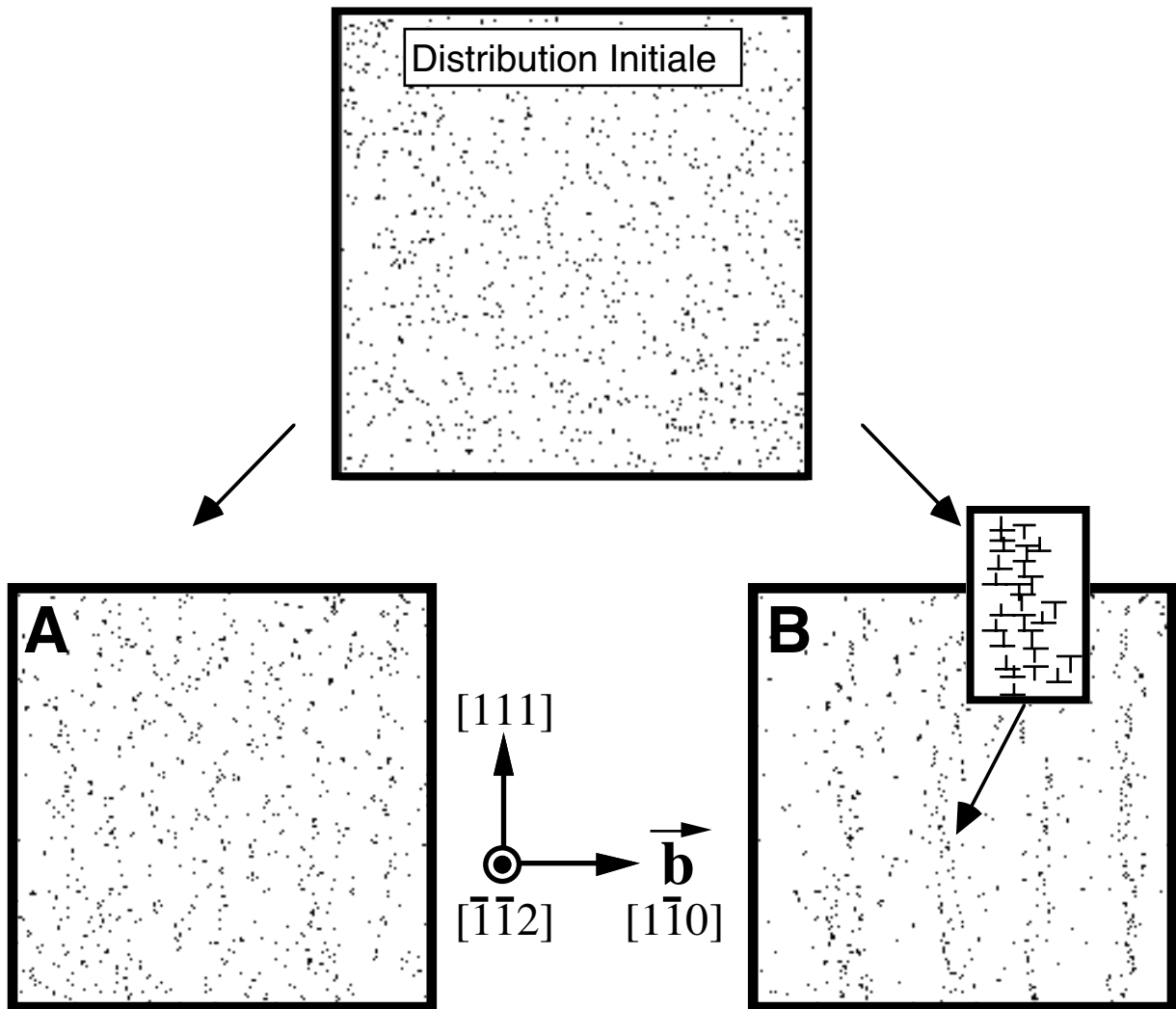


Fig. 48 : Simulations bidimensionnelles. La distribution initiale aléatoire contient 1000 dislocations coins vues de bout, dans une aire de  $(20 \mu\text{m})^2$ . La direction de glissement est horizontale. En A, configuration métastable relaxée en l'absence de contrainte appliquée. En B, configuration dynamique obtenue après cinq cycles de fatigue. Noter la formation de murs perpendiculaires à la direction de glissement.

L'évolution du système est étudiée en réponse à deux modes de sollicitation différents. Dans l'un, on examine une relaxation de la configuration initiale aléatoire en l'absence de force extérieure. Les dislocations se déplacent donc sous le seul effet de leur gradient d'énergie élastique. Lorsqu'elles sont toutes immobilisées, une configuration métastable est atteinte. Comme le montre la figure (48-A), les configurations obtenues sont de caractère dipolaire (cette dernière propriété est vérifiée plus loin) mais ne présentent aucune organisation à longue distance. La configuration d'ensemble est stable vis-à-vis

d'une faible contrainte appliquée; elle correspond donc bien à un minimum local d'énergie.

La figure (48-B) montre une image instantanée obtenue à partir de la même configuration initiale après cinq cycles de fatigue. La sollicitation cyclique est constituée de créneaux de contrainte (cf. III fig. 47) de  $0,8 \cdot 10^{-4} \mu$  imposés pendant une durée de 500 pas de la simulation. Nous avons vérifié que la configuration finale est peu sensible à la périodicité des cycles, pourvu que la distance de vol des dislocations entre inversion du signe de la contrainte appliquée soit suffisamment grande.

Dès les premiers pas de simulation, l'existence d'une force appliquée permet la destruction des configurations dipolaires les moins stables et maintient ainsi la mobilité d'une fraction des dislocations. Simultanément, les dislocations mobiles se regroupent et forment des sous-joints de dislocation glissiles, perpendiculaires à la direction de glissement. Ce mécanisme s'amplifie régulièrement jusqu'au moment où les sous-joints de signes opposés interagissent et s'immobilisent mutuellement. A ce stade, se forment des "parois" ou "murs" dipolaires contenant des paires de sous-joints de signes opposés (cf. fig. 48-B). Ce type de configuration est stable et ne se détruit que lors de l'inversion du sens de la contrainte appliquée. Une microstructure identique se reconstruit alors, les sous-joints de signes opposés ayant échangé leurs positions.

En présence d'une force extérieure et en l'absence de tout rayon de coupure imposé, il se forme donc une microstructure de murs de dislocation normaux aux plans de glissement et espacés d'une distance caractéristique de l'ordre du micromètre (fig. 48-B).

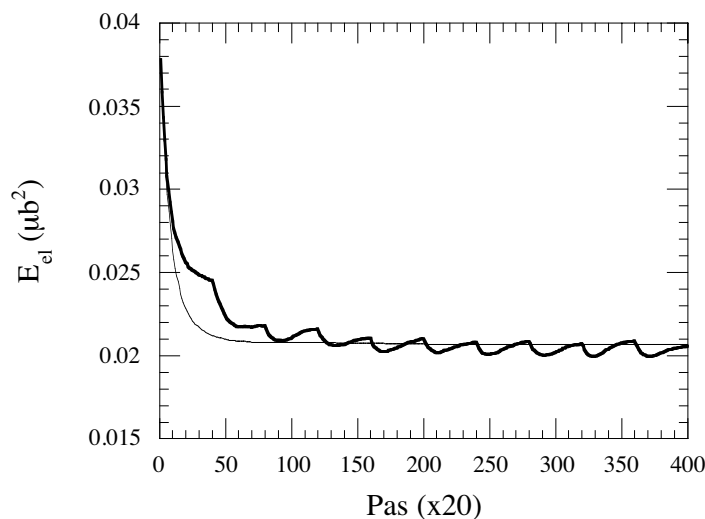


Fig. 49 : Variation de l'énergie d'interaction élastique totale (en unités réduites de  $\mu b^2$  par unité de longueur), au cours de simulations effectuées à partir de la configuration initiale de la fig. 48. La courbe en trait fin correspond au cas de la relaxation sans contrainte appliquée et la courbe en trait épais à une sollicitation en fatigue.



Afin de comparer cette configuration avec celle obtenue sans force appliquée, nous examinons les énergies élastiques totales correspondantes. La figure (49) représente les variations de ces quantités au cours des deux simulations. Après une décroissance initiale rapide, les deux systèmes tendent vers des valeurs de l'énergie pratiquement égales. Plus précisément, l'énergie associée aux murs de dislocation obtenus en sollicitation cyclique, qui correspond aux maxima de la courbe en traits épais sur la figure (49), est quasiment identique à celle de la configuration relaxée sans force extérieure (courbe en trait fin).

Ce résultat constitue une mise en évidence directe de la nature dynamique de l'émergence de microstructures organisées. Deux distributions spatiales de même état mais construites suivant des chemins différents dans "l'espace des phases" des dislocations, ne présentent d'organisation spatiale mésoscopique qu'en présence d'une force motrice extérieure (Devincre et Pontikis 1993).

Les prédictions du modèle de Holt (1970) ne sont donc pas réalistes et sont bien dues à des hypothèses arbitraires sur la description de la distribution aléatoire initiale (cf. Chapitre I-3). En revanche, déjà à deux dimensions, nous voyons apparaître spontanément une longueur d'échelle intrinsèque aux propriétés des dislocations.

## **B. Caractérisation et propriétés des microstructures**

### *Structures relaxées*

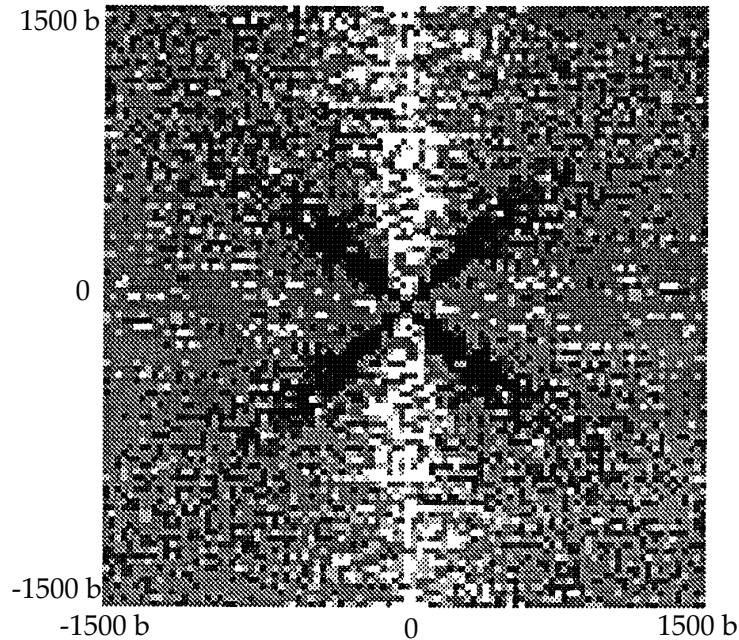
En l'absence d'une contrainte appliquée, la dynamique de la relaxation est globalement contrôlée par un processus de minimisation de l'énergie d'interaction élastique. Les simulations montrent l'émergence d'une structure auto-écrantée, de caractère dipolaire, qui s'immobilise lorsque sa stabilité l'emporte sur le faible gradient de contrainte interne. Cette organisation à courte distance peut se caractériser statistiquement par une fonction de distribution spatiale  $F(r)$ , analogue à celle utilisée par Holt (1970). Soit:

$$F(r) = [g^{++}(r)+g^{--}(r)] - [(g^{+-}(r)+g^{-+}(r))] \quad (43)$$

ou  $g(r)$  est une fonction de corrélation de paires. La fonction de distribution spatiale est donc la différence entre les fonctions de corrélation relatives aux dislocations de même signe et de signes opposés.

La figure (50) montre le résultat du calcul de  $F(r)$  sur la configuration de la figure (48-A). Elle met en évidence deux directions spatiales privilégiées. D'une part, les dislocations de signes opposés (zones noires) sont préférentiellement orientées à 45° les unes des autres. D'autre part, les dislocations de même signe (zones claires) ont tendance à

s'aligner verticalement. On retrouve donc bien dans cette microstructure multipolaire les orientations préférentielles des dipôles élémentaires de type coin.



*Fig. 50 : Fonction de corrélation spatiale,  $F(r)$ , calculée à partir de la configuration relaxée de dislocations de la figure (48-A). Les régions en noir, sont des régions de corrélation entre dislocations de signes opposés ( $F(r) < 0$ ). Les régions en blanc sont des régions où les dislocations sont préférentiellement de même signe ( $F(r) > 0$ ). Les longueurs sont exprimées en unité  $b$  vecteur de Burgers.*

### ***Microstructures dynamiques***

Nous examinons maintenant l'influence de la contrainte appliquée et de la densité de dislocations sur les microstructures dynamiques. Ce travail nécessite l'utilisation d'un outil de caractérisation statistique de la distribution spatiale des dislocations. Compte tenu de la nature périodique des fluctuations spatiales des densités, il nous a paru approprié de calculer les longueurs d'onde caractéristiques à l'aide d'un facteur de structure  $S(\mathbf{k})$  (Hansen et McDonald 1986).

La figure (51) donne un exemple de calcul de cette fonction à partir de la distribution spatiale de la figure (48-B). Le maximum du facteur de structure est atteint pour le vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  dans l'espace de Fourier correspondant à l'existence d'une structure dans la direction de glissement des dislocations, de périodicité  $\lambda = 2\pi/k \approx 6 \mu\text{m}$ . Nous pouvons ainsi caractériser numériquement et de manière objective les structures spatiales auto-organisées fournies par la simulation.

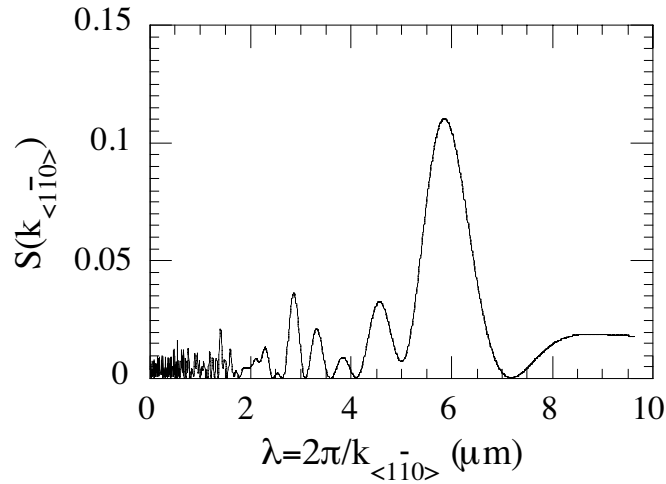


Fig. 51 : Facteur de structure  $S(\mathbf{k})$  calculé à partir de la configuration de la fig. (48-B).  $S(\mathbf{k})$  est la transformée de Fourier des composantes de la fonction de densité locale dans la direction du vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  choisi parallèlement à la direction du vecteur de Burgers  $[1\bar{1}0]$ . Le maximum de la fonction correspond à la période spatiale de la microstructure dans l'espace direct.

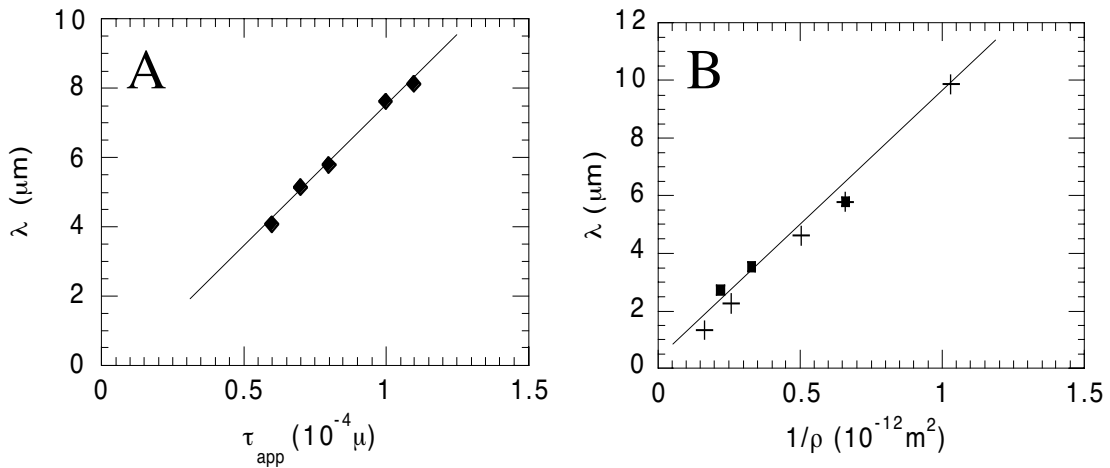


Fig. 52 : Variations de  $\lambda$ , distance entre murs de dislocation formés au cours des simulations à 2-D, en fonction des conditions imposées. En A, la densité de dislocations est maintenue constante ( $\rho = 1.5 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$ ) et on fait varier l'amplitude de la contrainte appliquée,  $\tau_{app}$ . En B, la contrainte appliquée est constante ( $\tau_{app} = 0.8 \cdot 10^{-4} \mu$ ) et on fait varier la densité de dislocations, soit en changeant le nombre de dislocations à l'intérieur d'une aire de simulation constante (croix), soit en appliquant une homothétie sur la boîte de simulation (carrés). La dimension des marques utilisées donne les barres d'erreur sur le calcul de  $\lambda$ .

Nous avons effectué une étude systématique de l'influence de la contrainte de cisaillement appliquée  $\tau_{app}$ , et de la densité de dislocation,  $\rho$ , sur la longueur d'onde caractéristique  $\lambda$  des microstructures, cette dernière quantité étant déterminée à partir du facteur de structure  $S(\mathbf{k})$ . Les résultats de ces différentes simulations sont rassemblés sur les figures (52-A) et (52-B).

A densité fixe, la longueur d'onde caractéristique augmente avec la contrainte appliquée (fig. 52-A). L'hétérogénéité croît sous l'influence de la dynamique et s'annule à contrainte nulle. A contrainte appliquée constante, la distance entre murs est inversement proportionnelle à la densité totale (fig. 52-B). Une densité croissante se distribue donc sur un plus grand nombre de parois (Devincre et Pontikis 1993). Ces deux relations peuvent se résumer sous la forme

$$\lambda \propto \tau_{app} / \rho \quad (44)$$

Ce comportement des microstructures de dislocations en 2-D, diffère donc à première vue des observations expérimentales tridimensionnelles. En l'absence d'interactions du type forêt, il semble normal de ne pas voir apparaître de loi d'échelle en  $\rho^{-1/2}$ . Il est plus intéressant de noter que les structures bi-dimensionnelles ne satisfont pas au "principe de similitude". Il n'est pas possible de savoir si l'expression (44) serait modifiée en présence d'annihilation et de multiplication, faute de pouvoir décrire cette dernière de manière cohérente avec des dislocations rigides.

Afin de mieux comprendre ces résultats et discuter les différences entre mécanismes d'organisation en 2-D et microstructures réelles en 3-D, nous procédons maintenant à une étude plus détaillée des mécanismes élémentaires conduisant à la formation des parois.

#### IV-3. MODÈLE PHÉNOMÉNOLOGIQUE

L'existence d'une contrainte appliquée permet l'apparition de propriétés dynamiques collectives entre dislocations. La succession d'événements se décrit comme suit. D'abord se forment des dipôles isolés. Ensuite, une corrélation entre les déplacements des dislocations de même signe s'instaure et permet progressivement la formation d'une seconde structure formée de paires de sous-joints de dimensions finies. Le mécanisme de croissance de tels sous-joints est partiellement décrit dans la littérature en relation avec le stade de glissement simple (Nabarro 1986) : à leurs extrémités, ils incorporent les dislocations mobiles de même signe qui passent dans leur rayon d'action, tandis que des dislocations sont émises ou annihilées en permanence dans le sous-joint. Dans le présent

cas, ils interagissent essentiellement avec les dipôles existants. En deux dimensions et en l'absence de multiplication (et d'empilements), ces sous-joints sont mobiles et finissent par se rassembler deux à deux en parois dipolaires. Ce dernier type de configuration peut être défini comme une structure polarisée (Hasegawa, Yakou et Kocks 1986) : pour un signe donné de la contrainte appliquée, les dislocations d'un même signe sont toujours d'un même côté par rapport à celles de l'autre signe. La contrainte interne a le même signe que la contrainte appliquée entre les deux sous-joints et s'oppose à elle à l'extérieur.

Dans une description plus précise, il faut tenir compte du fait que la structure dipolaire initiale n'est stable sous contrainte que de manière conditionnelle. La théorie élastique des dislocations montre qu'il existe une distance critique d'instabilité pour un dipôle isolé en présence d'une force appliquée (Fig. 53). Cette distance,  $d_c$ , est donnée par :

$$d_c = \frac{\mu b}{8\pi(1-\nu)} \frac{1}{\tau_{app}} \quad (45)$$

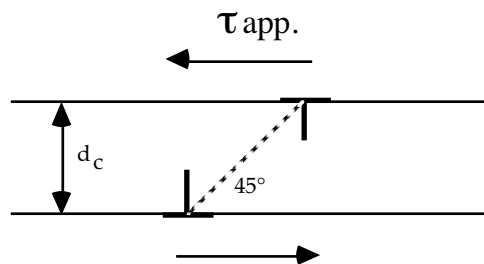


Fig. 53: Configuration stable à 45° d'un dipôle coin.  $d_c$  est la distance critique de stabilité du dipôle en présence d'une contrainte appliquée  $\tau_{app}$  donnée.

Au cours des premiers pas de la simulation, c'est ce mécanisme de passage entre dislocations coins qui définit le seuil de mobilité, via la destruction d'une partie des dipôles. Les dislocations se regroupant sous forme de sous-joints mobiles, ceux-ci interagissent avec les dipôles restants et déstabilisent certains d'entre eux. Ce mécanisme de "balayage" du cristal par des sous-joints réduit la distance critique d'instabilité des dipôles à une valeur  $d_c^{\circ}$ , dont le calcul est donné dans la littérature (Li 1960, Neumann 1971):

$$d_c^{\circ} \approx \frac{\mu b}{16\pi(1-\nu)} \frac{1}{\tau_{app}} \quad (46)$$

Cette expression peut se justifier simplement. A courte distance, le champ de self-contrainte d'un sous-joint est équivalent à celui des deux plus proches dislocations. Ainsi, un segment d'un dipôle ressent, sous l'effet d'un sous-joint de signe opposé une contrainte effective deux fois plus élevée qu'en l'absence de celui-ci lorsque la condition critique est atteinte. Il faut donc réduire en moyenne de moitié la distance critique de stabilité d'un dipôle isolé telle qu'elle est donnée par l'équation (45).

Ce mécanisme de "balayage" des dislocations joue un double rôle. D'une part, il accroît la densité mobile en détruisant les dipôles les moins stables. D'autre part, il abaisse l'énergie élastique totale en favorisant le regroupement des dislocations dans les sous-joints de dislocation. Ce mécanisme collectif se prolonge jusqu'au moment où les parois dipolaires stables sont formées. Cette limite dynamique est atteinte pour une densité critique de dislocations qui est fonction de la contrainte appliquée. A cette densité critique, la distance entre dislocations à l'intérieur des parois vérifie localement la condition de stabilité des dipôles (eq. 46). En moyenne à chaque segment est associée une aire d' $d'_c^2$ , ce qui définit la densité dans les murs:

$$\rho_{\text{mur}} \approx d'_c{}^2 \quad (47)$$

La densité totale  $\rho$  est la moyenne spatiale d'une densité négligeable entre parois et qui vaut  $d'_c{}^{-2}$  sur une fraction  $d'_c/\lambda$  de l'aire simulée. En admettant l'équidistance des murs de dislocations nous en déduisons:

$$\rho \approx 1/(\lambda d'_c) \quad (48)$$

Ou encore, à l'aide de l'expression (46):

$$\lambda \approx \frac{16\pi(1-\nu)}{\mu b} \frac{\tau_{app}}{\rho} \quad (47)$$

Nous retrouvons ainsi le résultat issu des simulations (cf. eq. 44). Les résultats des simulations (figs. 52-A et -B) sont regroupés et comparés aux résultats de l'équation phénoménologique (47) sur la figure 54. L'excellent accord obtenu conduit à penser que le mécanisme dynamique que nous venons de décrire est bien à l'origine de la formation des microstructures de dislocations en 2-D.

L'hypothèse essentielle que nous avons utilisée est classique dans l'étude de la fatigue (Neumann 1986). Elle consiste à supposer qu'à tout instant les structures dipolaires sont à la limite de la stabilité. Dans le cas présent, ces configurations sont suffisamment simples pour que les contraintes critiques puissent être évaluées avec une bonne précision.

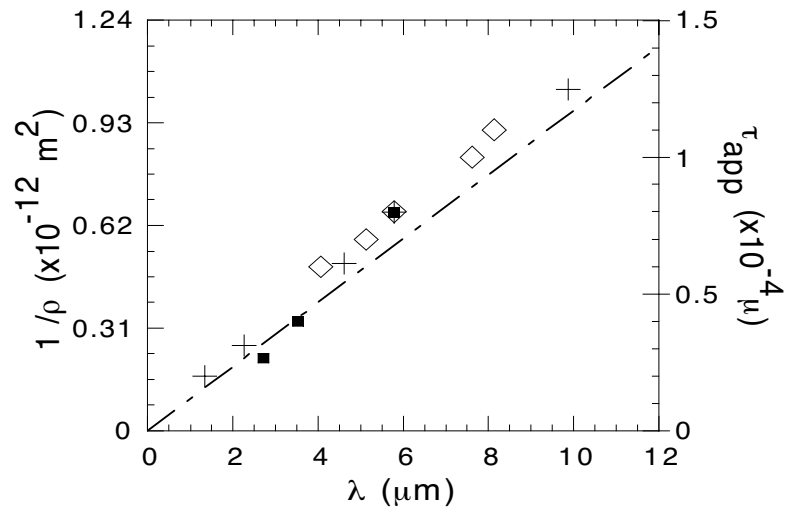


Fig. 54 : Variations de la contrainte appliquée et de l'inverse de la densité en fonction de la distance entre murs  $\lambda$ . Les résultats simulés sont extraits de la figure 52; la ligne discontinue représente les prédictions du modèle phénoménologique.

L'analyse à laquelle nous avons procédé ne fait intervenir les interactions élastiques que dans la mesure où il faut justifier l'équidistance entre les murs de dislocation. Bouchaud et Bouchaud (1992), et Saada et Bouchaud (1993) ont montré que le champ de self-contrainte d'un mur dipolaire de dimension finie présente à grande distance une légère bosse. La position exacte de ce pic de contraintes est fonction de la densité et d'un éventuel désordre de position des dislocations à l'intérieur des murs. Ces auteurs suggèrent que cet effet pourrait induire la formation de structures périodiques, ancrées sur ces positions particulières.

Dans le cadre de nos simulations, nous avons vérifié l'existence de ces maxima de part et d'autre des sous-joints de dislocations. Sur la fig. 55 sont représentés les variations du champ de contrainte interne, associé à un mur de dislocation construit à partir des simulations. Le champ de self-contrainte est calculé à intervalle régulier dans la direction normale aux dislocations et on balaye toute la hauteur du mur. La position de la bosse varie en fonction de la hauteur et est comprise entre une distance de l'ordre de  $2\lambda$  et  $0.2\lambda$ . L'amplitude de la contrainte est proche de celle de la contrainte appliquée et de signe opposé de part et d'autre du mur.

La courbure du champ de contrainte étant faible au maximum et sa localisation se déplaçant spatialement, il est difficile d'invoquer ce mécanisme pour expliquer la périodicité des murs observée.

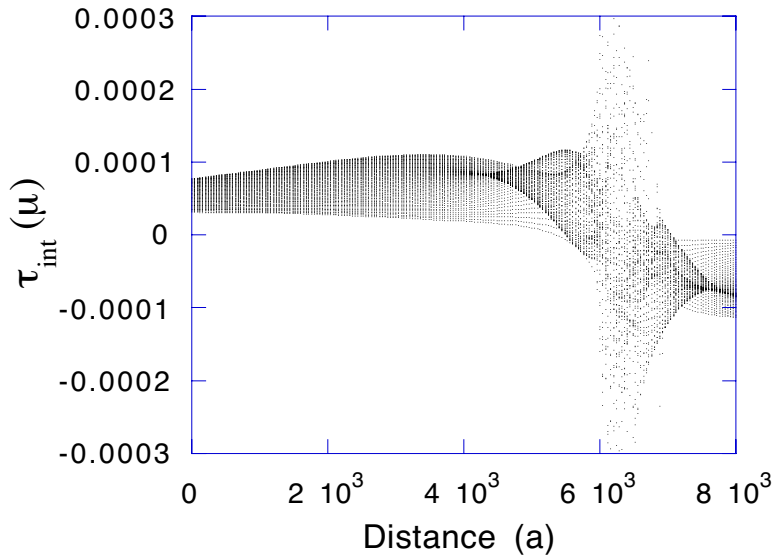


Fig. 55 : Variations du champ de contrainte d'un mur de dislocation issu des simulations. En abscisse est donné la distance dans la direction normale au mur exprimée en unité  $a$ , taille des cellules du réseau de simulation à 2D ( $a=3.21\text{nm}$ ) et en ordonnée le champ de self-contrainte en unité  $\mu$  calculé à différentes hauteurs du mur. Le mur est positionné environ en  $6500a$ .

La raison pour laquelle une structure périodique se forme dans le cas présent nous semble, en fait, beaucoup plus simple. Le champ de contrainte d'une paroi dipolaire de dimension finie décroît avec la distance, mais garde une valeur non négligeable à des distances de l'ordre de sa hauteur. Comme nous n'avons pas introduit de force de friction, les parois ont tendance à se repousser afin de minimiser leur énergie d'interaction. Par ailleurs, le nombre des parois est imposé par le fait que leur structure ainsi que la densité totale sont fixées.

Ces conditions imposent donc la période donnée par l'expression (47). Il ne peut exister de structures plus complexes (parois quadrupolaires ou autres), qui seraient plus efficacement auto-écrantées, car leur formation impliquerait le franchissement mutuel des sous-joints de signes opposés.

Finalement, il est possible de prolonger le modèle proposé ci-dessus afin de le relier à des résultats tri-dimensionnels. L'existence d'une relation entre densité de dislocations et distance entre murs est spécifique des conditions à 2-D. Dans la réalité, c'est la contrainte appliquée et la densité de dislocations qui sont corrélées par l'expression :

$$\tau_{app} = \alpha \mu b \sqrt{\rho} \quad (48)$$



Si, de manière empirique, nous combinons les expressions (47) et (48), nous obtenons

$$\lambda \approx 16\pi(1 - \nu)\alpha^2 \mu b / \tau_{app} \quad (49)$$

ou encore,

$$\tau_{app} \approx K\mu b / \lambda \quad (50)$$

qui satisfait au principe de similitude. Sur la figure 56, sont reportées la prédiction de l'équation (49), avec  $\alpha = 1/2$ , et des valeurs expérimentales relatives à des cellules de dislocations (d'après Staker et Holt 1972). Après modification, la "loi de comportement" paraît très proche de celle observée expérimentalement.

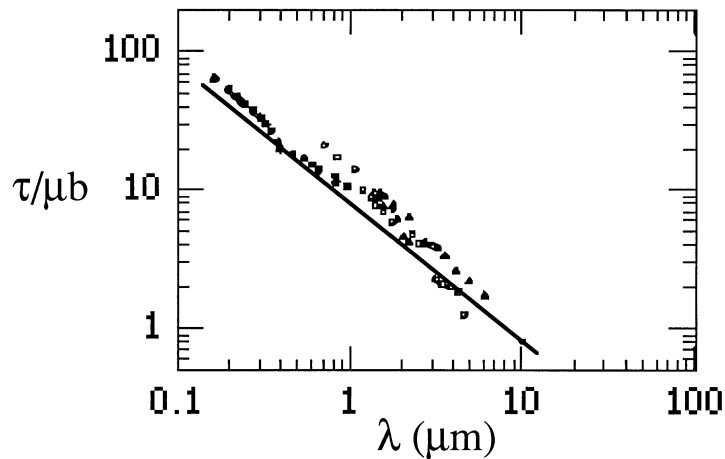


Fig. 56 : Validation expérimentale du principe de similitude dans le cas des métaux (Cu, Al et Fe) de structure CFC (Staker et Holt 1972). On compare la variation de contrainte d'écoulement en unités réduites avec la taille des cellules de dislocation correspondantes,  $\lambda$ , sur un diagramme Log-Log. Le trait continu représente l'équation phénoménologique (49) avec  $\alpha=1/2$ .

Il est donc intéressant de noter que nous retrouvons le principe de similitude en accord avec l'expérience, alors que l'une des deux expressions à l'origine de l'équation (50) est tout à fait originale car elle est issue des simulations bidimensionnelles.

#### IV-4. CONCLUSIONS

Les conditions de formation d'une microstructure de dislocations dans un modèle simple de déformation plastique bidimensionnelle ont été étudiées par simulation numérique. Nous avons montré qu'une population de dislocations rectilignes de même

vecteur de Burgers ne s'organise spatialement qu'en présence d'une force extérieure. L'auto-organisation de ces dislocations ne répond pas à un critère thermodynamique de minimisation de l'énergie élastique, mais résulte de propriétés collectives en présence d'une force extérieure.

Ce résultat va à l'encontre du modèle de Holt (1970) dont nous avons déjà montré qu'il était basé sur un postulat inexact (cf. Chapitre I-3). En ce qui concerne les modèles bi-dimensionnels de la fatigue, comme ceux d'Aifantis (1986) ou Kratochvil et al. (1992), on peut se demander si le fait de ne pas tenir compte de l'effet de la contrainte appliquée sur la stabilité des structures dipolaires ne pose pas problème. Par exemple, Kratochvil et al. (1992) invoquent un mécanisme de balayage des dipôles coins par les dislocations vis comme responsable de la formation des veines dipolaires. Si une contrainte appliquée existe, il est difficile d'imaginer qu'elle ne conduise pas à la destruction des dipôles coins.

Enfin, les simulations bidimensionnelles de la plasticité montrent que l'existence d'interactions élastiques suffit à reproduire des propriétés importantes des microstructures de dislocations. Dans ce cas simple, il semble que l'on puisse comprendre sans trop de difficulté l'origine de l'auto-organisation. Il va de soi, qu'une étude équivalente devient rapidement difficile à trois dimensions, compte tenu du grand nombre de mécanismes simultanément mis en jeu.

# CHAPITRE V

## ÉCOULEMENT PLASTIQUE "TURBULENT"



## V. ÉCOULEMENT PLASTIQUE “TURBULENT”

Les mécanismes de déformation plastique à basse température diffèrent beaucoup lorsque l'on passe des conditions du glissement simple (stade I des CFC) à des modes de sollicitation où plusieurs systèmes de glissement participent à la déformation plastique. Dans ces conditions, les dislocations non-coplanaires interagissent à courte distance et accentuent l'écroutissage plastique (voir chapitre I). Ces modes de déformation sont souvent qualifiés d'écoulements “turbulents” (Cottrell 1953).

On comprend assez bien la relation fonctionnelle qui existe entre l'activité d'au moins deux systèmes de glissement et l'accroissement du taux de durcissement. Au cours de la déformation, le “milieu” dans lequel se propagent les dislocations devient de plus en plus dense, ce qui augmente la contrainte critique de franchissement et limite le libre parcours moyen entre obstacles.

Par contre, il est plus difficile d'établir une relation simple entre l'activité de plusieurs systèmes de glissement et les conditions de formation d'une microstructure de dislocations organisée dans l'espace.

Dans ce chapitre nous décrivons et discutons les résultats de simulations à deux et trois dimensions des propriétés dynamiques des dislocations en écoulement “turbulent”. En premier lieu, nous regardons l'influence d'un second système de glissement sur les simulations à 2-D du chapitre précédent. Ensuite, nous présentons les premiers résultats des simulations de la plasticité en 3-D. Nous discutons plus particulièrement l'influence des interactions à courte et à longue distance sur les propriétés mécaniques. Les hypothèses du modèle cinétique de Kocks sur la formation des microstructures de dislocations sont ensuite testées à l'aide de notre modèle. Ce travail nous conduit naturellement à nous interroger sur l'origine de l'augmentation de la densité de la forêt pendant la déformation plastique. Enfin, nous examinons les propriétés des microstructures obtenues en sollicitation uniaxiale.

### V-1. SIMULATIONS DU GLISSEMENT DOUBLE EN 2-D

#### **A. Conditions des simulations**

Le système de dislocations coins rectilignes infinies et de même vecteur de Burgers étudié au chapitre précédent est modifié pour inclure un second système de glissement. Ce second modèle bidimensionnel constitue une étape de transition vers la modélisation de systèmes plus réalistes à trois dimensions. Il permet d'étudier dans des conditions

simples l'influence sur les propriétés dynamiques des interactions élastiques entre deux populations de dislocations de vecteurs de Burgers différents.

Le système modèle est défini par des dislocations coins rectilignes de direction  $[001]$ , partagées pour moitié entre les vecteurs de Burgers  $\mathbf{b}_1 = [1\bar{1}0]$  et  $\mathbf{b}_2 = [110]$ , glissant dans deux plans de glissement  $(110)$  et  $(1\bar{1}0)$  orthogonaux. Le fait que toutes les lignes soient parallèles rend possible une représentation bidimensionnelle. D'après les règles d'interactions locales adoptées dans la simulation, ces deux systèmes ne forment pas de jonctions (voir chapitre III-2). En effet, si deux dislocations de vecteurs de Burgers  $\mathbf{b}_1$  et  $\mathbf{b}_2$  se rencontrent sur un même noeud du réseau, leur recombinaison n'est pas énergétiquement favorable, puisque  $\mathbf{b}_1^2 + \mathbf{b}_2^2 = (\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2)^2$ . En conséquence, les deux dislocations en interaction restent individualisées et aucun ancrage n'est formé. Au cours des simulations, la dynamique des dislocations est donc uniquement contrôlée par les interactions élastiques et la contrainte appliquée.

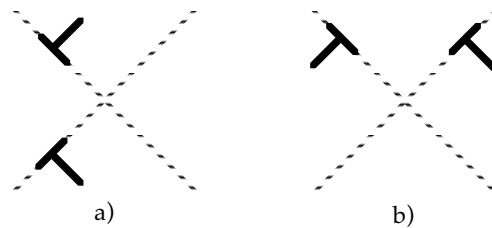
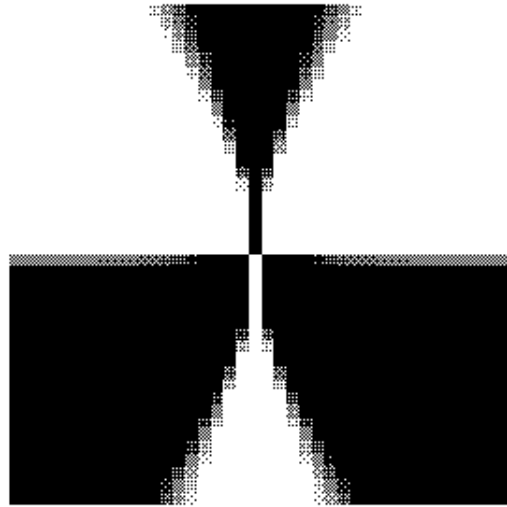


Fig. 57 : Configurations d'équilibre, a) verticale et b) horizontale, de deux dislocations parallèles de direction  $[001]$  et de vecteurs de Burgers orthogonaux  $\mathbf{b}_1 = [1\bar{1}0]$  et  $\mathbf{b}_2 = [110]$ . Les configurations stables ne se situent pas à l'intersection des lignes.

Une étude de la stabilité des interactions entre les dislocations de vecteurs de Burgers  $\mathbf{b}_1$  et  $\mathbf{b}_2$  montre qu'il existe toujours des configurations stables. Ces configurations tendent à s'aligner dans les directions à  $45^\circ$  des plans de glissement, correspondant aux directions horizontale et verticale de l'aire de simulation (Fig. 57). Elles constituent des minima d'énergie locaux mais, contrairement au cas des dipôles, leur champ de self-contrainte n'est pas auto-écranté et continue de décroître comme l'inverse de la distance ( $\sigma_{ij} \propto 1/r$ ). Même en l'absence de jonctions, ce mécanisme de blocage peut constituer un obstacle au mouvement d'autres dislocations. La figure 58 montre la variation spatiale de la composante  $\pm (\sigma_{11} - \sigma_{22})/2$  du tenseur de self-contrainte de ces pseudo-dipôles. Cette composante est celle qui agit sur les autres dislocations; elle présente deux lobes en tension et deux lobes en compression et s'annule suivant les axes vertical et horizontal. Dans ces conditions, les positions stables d'une dislocation interagissant avec un pseudo-dipôle se situent toujours suivant les axes horizontal et vertical de celui-ci, c'est à dire suivant des directions à  $45^\circ$  des plans de glissement. Cette

propriété découle de la forme du champ de contrainte représenté sur la figure 58 et se trouve bien vérifiée dynamiquement au cours des simulations.



*Fig. 58 : Variation spatiale de la composante  $(\sigma_{11}-\sigma_{22})/2$  du champ de self-contrainte d'un pseudo-dipôle (cf. fig. 57-b). Cette composante est celle qui agit sur les autres dislocations. Le spectre de densité compris entre le blanc et le noir correspond à des contraintes allant respectivement du signe plus (tension) au signe moins (compression).*

## **B. Caractérisation des microstructures**

Comme au chapitre précédent, et dans les mêmes conditions, nous comparons les propriétés dynamiques d'une population de dislocations initiale aléatoire avec et sans l'influence d'une force extérieure. La figure (59-A) représente l'état final d'une distribution de 1000 segments coin ( $\rho \approx 2,7 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$ ) après minimisation de l'énergie élastique en l'absence d'une sollicitation appliquée. Cet état est comparé à la configuration de la figure (59-B), obtenue après cinq cycles de fatigue d'amplitude  $\sigma_{11} = \pm 2 \cdot 10^{-4} \mu$ .

Une fois encore, les microstructures obtenues lors des simulations sous contrainte appliquée semblent plus nettement organisées. Il existe cependant une certaine similitude entre les deux configurations finales. Dans les deux cas, il se forme dès les premiers pas de la simulation un "squelette" de dislocations immobiles, piégées par leurs interactions élastiques. Les microstructures ne comportent plus de murs de dislocation perpendiculaires aux directions de glissement, mais plutôt des "cellules" bidimensionnelles. Au cours des simulations effectuées en fatigue, la densité de dislocation mobiles est faible (typiquement 20% de la densité totale). Le rôle de la force appliquée consiste seulement à "transporter" les dislocations mobiles jusqu'aux amas stables où elles sont immobilisées.

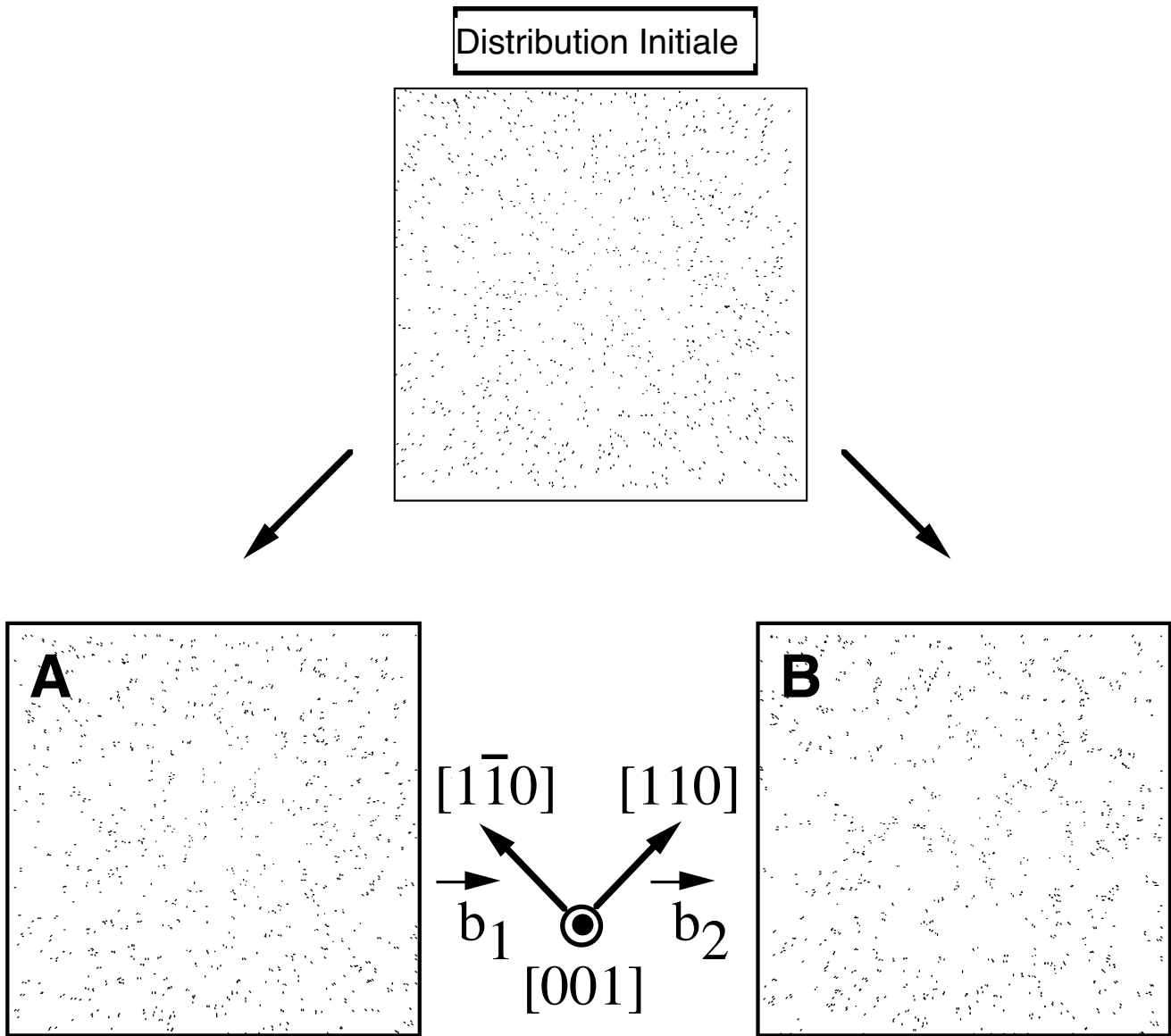


Fig. 59 : Évolution d'une distribution aléatoire de 1000 segments de dislocations répartie sur deux systèmes de glissement orthogonaux ( $\pm 45^\circ$ ). L'aire simulée est de  $(15\mu\text{m})^2$ . La configuration A est obtenue après relaxation sans force appliquée. La configuration B est obtenue à partir de la même configuration initiale, après cinq cycles de fatigue d'amplitude  $\sigma_{11} = \pm 2 \cdot 10^{-4} \mu$ .

Ces différentes configurations peuvent être caractérisées de manière quantitative en recherchant les corrélations spatiales à l'aide du facteur de structure  $S(\mathbf{k})$ .



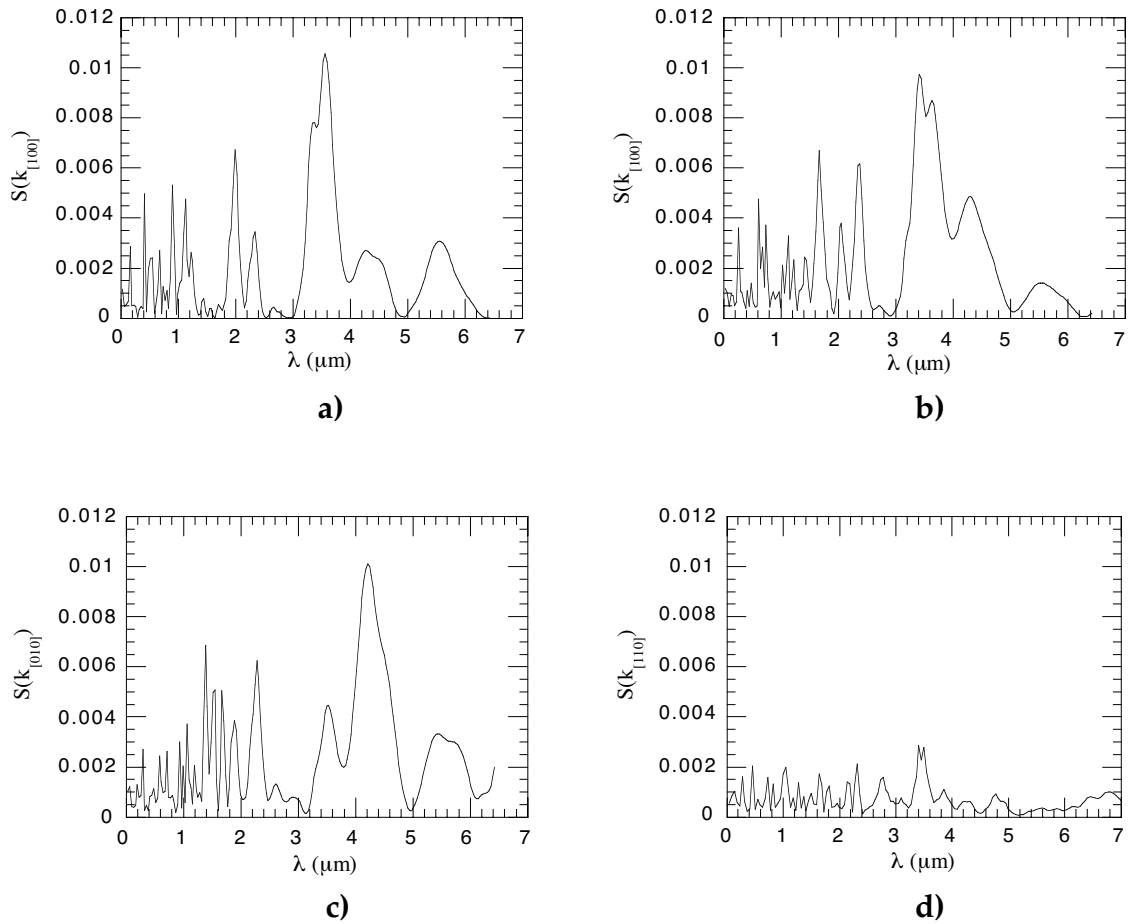


Fig. 60 : Facteurs de structure  $S(\mathbf{k})$  calculés à partir des distributions de dislocations issues des simulations de la figure (59). Le maximum de  $S(\mathbf{k})$  correspond à la longueur d'onde préférentielle des microstructures dans la direction de  $\mathbf{k}$ , de norme  $2\pi/\lambda$ . Le facteur de structure est calculé: - a) sur la distribution relaxée de la figure (59-A) et dans la direction  $[100]$ . - b), c) et d) Sur la distribution (59-B) et dans les directions  $[100]$ ,  $[010]$  et  $[110]$ , respectivement.

En moyenne sur plusieurs configurations instantanées, le calcul du facteur de structure montre que :

- Les microstructures obtenues avec et sans force appliquée sont très voisines les unes des autres. Cela se voit en comparant les figures 60 a) et b).
- L'organisation spatiale n'est pas parfaitement isotrope, le maximum du facteur de structure étant plus accentué dans les directions  $[100]$  et  $[010]$ . Ce résultat concorde avec notre analyse du champ de self-contraintes des pseudo-dipôles. La formation de ceux-ci favorise le blocage des dislocations et leur alignement suivant des directions à  $45^\circ$  des plans de glissement. Par contre, le mécanisme dynamique de formation des sous-joints de

dislocations mobiles observé au chapitre IV a perdu son efficacité. En effet, le pic de structure dans les directions de glissement est sensiblement réduit (cf. fig. 60-d).

- Bien que son intensité varie, la position du maximum du facteur de structure est indépendante de l'orientation. Les "cellules" bidimensionnelles présentent donc une symétrie circulaire, avec une longueur d'onde mésoscopique  $\lambda \approx 4\mu\text{m}$  (cf. figures 60-b, c et d). Cette valeur n'est pas très différente de celle obtenue dans des conditions similaires pour des murs de dislocations en glissement simple (cf. Chapitre III, eq. 49):  $\lambda_{\text{mur}} \approx 4,8\mu\text{m}$  pour  $\rho = 2,7 \cdot 10^{12}\text{m}^{-2}$  et  $\tau_{\text{app}} = 10^{-4}\mu$ .

- A densité donnée, la longueur d'onde caractéristique est indépendante de la contrainte appliquée. Les "cellules" bidimensionnelles n'obéissent donc pas au principe de similitude. Au delà d'une contrainte seuil ( $\sigma_{11} = \pm 3 \cdot 10^{-4} \mu$  pour  $\rho = 2,7 \cdot 10^{12} \text{m}^{-2}$ ), le "squelette" de dislocations immobiles est déstabilisé. La microstructure évolue alors rapidement au cours des cycles de fatigue et une densité importante de dislocations s'accumule aux limites de l'aire de simulation.

### C. Discussion

La prise en compte dans les simulations bidimensionnelles d'une nouvelle propriété, l'interaction entre deux systèmes de glissement, modifie les conditions d'organisation des dislocations. Pour une densité de dislocation donnée, la microstructure n'est plus uniquement le résultat des propriétés dynamiques des dislocations en présence d'une force appliquée. En glissement double à 2-D, l'organisation est la conséquence de la formation et de la croissance de configurations stables dans un environnement rigidifié par de nombreux points d'accumulation (dipôles et pseudo-dipôles).

Par référence aux modèles discutés au chapitre I, nous montrons donc qu'il ne peut y avoir de formation de structure cellulaire sans points d'ancrage stables sous la contrainte appliquée. Cela conduit une fois de plus à écarter le modèle de Holt (1970). Du point de vue énergétique, les configurations formées conduisent certainement à des minima métastables de l'énergie élastique totale à densité fixée (c'est à dire par unité de longueur de ligne de dislocation). Il est cependant difficile d'affirmer qu'il s'agit là du minimum absolu prévu par les modèles du type LEDS (Kuhlmann-Wilsdorf 1962), car les configurations sont loin d'être auto-écranées. L'évolution observée est qualitativement semblable à celle prédite par le modèle de Kocks (1966). Malgré leur stabilité moindre que celle des jonctions sessiles, les pseudo-dipôles induisent, par blocage des dislocations immobiles, la formation de structures qui finissent par s'interconnecter pour former des "cellules". Comme attendu, les simulations montrent que la résistance au glissement est accrue lorsque deux systèmes de glissement sont actifs au cours de la déformation. Les configurations bloquées sont nettement plus stables qu'en glissement simple ce qui

entraîne une réduction de la densité mobile et de la déformation enregistrée par pas de la simulation.

Enfin, nous notons que la formation de cellules bidimensionnelles en glissement double ne requiert pas l'intervention du glissement dévié. C'est le champ de déformation des pseudo-dipôles qui oriente la construction des "murs cellulaires", sans que les dislocations aient à quitter leur plan de glissement. En revanche, cette structure qui n'obéit pas au principe de similitude n'est pas capable de s'adapter à des contraintes croissantes. Sa destruction devient inévitable passé un certain seuil de contrainte. On illustre ainsi l'importance des mécanismes élémentaires de la plasticité absents des simulations à 2-D, la multiplication et le glissement dévié, qui doivent permettre la formation, sous des contraintes croissantes, de configurations de plus en plus stables.

## V-2. SIMULATIONS TRIDIMENSIONNELLES : PROPRIÉTÉS MÉCANIQUES

Les simulations de la plasticité à 2-D permettent une étude de la dynamique des dislocations dans des conditions idéalisées. Malheureusement, ces conditions sont trop éloignées de la réalité et les résultats obtenus sont à la fois partiels et qualitatifs. La formation d'une microstructure de dislocations à 2-D résulte uniquement, dans notre cas, des interactions élastiques entre dislocations rectilignes infinies. Il n'est pas possible d'inclure des propriétés essentielles comme la tension de ligne, la multiplication ou la formation de jonctions sessiles sans les caricaturer à l'excès. On peut se demander alors comment sont modifiées nos conclusions précédentes avec la prise en compte en trois dimensions de nouvelles propriétés, importantes à la fois du point de vue énergétique et dynamique.

Comme notre modèle tridimensionnel s'efforce d'être quantitatif, il permet, en principe, d'examiner à la fois l'organisation mésoscopique des dislocations et les propriétés mécaniques. Dans cette partie, nous abandonnons temporairement l'étude des microstructures, pour étudier la sensibilité des propriétés mécaniques aux interactions entre dislocations à courte et à longue distance.

### **A. Courbes de déformation**

Dans le cas des cristaux CFC à basse température (et en l'absence de forces de friction de réseau), les propriétés d'écrouissage dépendent de deux mécanismes complémentaires:

- D'une part, les dislocations peuvent être immobilisées par des interactions élastiques, c'est-à-dire par la contrainte interne. Ce mécanisme de durcissement est le seul présent dans les simulations bidimensionnelles.

- D'autre part, les dislocations mobiles interagissent à courte distance avec les dislocations non-coplanaires de la forêt. Ces réactions forment des segments de dislocations sessiles dans les plans de glissement (cf. Chapitre III-2).

Il est très difficile d'estimer expérimentalement les contributions relatives de ces deux mécanismes au durcissement plastique. C'est pourquoi une expérience effectuée à l'ordinateur peut être utile pour vérifier les prédictions du modèle de la forêt (cf. Chapitre I-2). Nous avons donc réalisé des simulations tridimensionnelles de la dynamique des dislocations permettant de comparer, pour un même matériau, les courbes de déformation obtenues avec les interactions élastiques entre dislocations et en omettant le calcul de ces dernières. Les paramètres du glissement dévié sont choisis de manière à bloquer son activation. Les deux calculs ne se différencient alors plus que par l'existence d'une contrainte interne dans l'un des deux cas.

Les conditions de simulation sont similaires à celles d'un essai de traction sur un monocristal CFC. En pratique, le coefficient de frottement visqueux, le module du vecteur de Burgers et les constantes élastiques sont ceux du cuivre (cf. Annexe III). En ce qui concerne le module de cisaillement, la comparaison entre des calculs menés sur les dislocations en élasticité anisotrope et isotrope montre que la moyenne conduisant aux meilleurs résultats est celle de Voigt (Kocks, Argon et Ashby 1975). Nous imposons soit une vitesse de déformation constante  $d\varepsilon_{33}/dt = 15 \text{ s}^{-1}$ , soit une vitesse de chargement constante  $d\sigma_{33}/dt = 5 \mu\text{s}^{-1}$ . A vitesse de déformation imposée, la pente instantanée de la courbe de déformation est définie par  $\theta = d\sigma/d\varepsilon = (d\sigma/dt)/(d\varepsilon/dt)$ . Cette relation permet d'établir une équivalence entre vitesses de chargement et vitesses de déformation. Dans le cas présent, le rapport de ces deux vitesses correspond à la valeur très élevée de  $5\mu/15 = \mu/3$ . Dans ces conditions, l'essai à vitesse de chargement imposée correspond, au delà de la limite élastique, à des vitesses de déformation de l'ordre du  $100 \text{ s}^{-1}$ . Comme nous l'avons vu au Chapitre III-6 de telles valeurs sont proches des limites permises pour notre simulation. L'avantage est, cependant, de permettre d'approcher des déformations totales plus importantes en augmentant la déformation obtenue par pas de la simulation. Les essais menés avec une vitesse de déformation comparativement plus faible sont, en principe, plus directement interprétables, mais ils conduisent à des déformations totales notablement plus faibles.

L'axe de traction est pris suivant la direction [001]. Comme l'orientation choisie induit des conditions de glissement multiple, la configuration initiale, de densité  $\rho_i = 4 \cdot 10^{11} \text{ m}^{-2}$ , contient une distribution de segments sur tous les 12 systèmes possibles. La contrainte appliquée initiale est d'environ 80% de la limite élastique.

La figure 61 reproduit les courbes contrainte-déformation obtenues au cours de ces simulations.

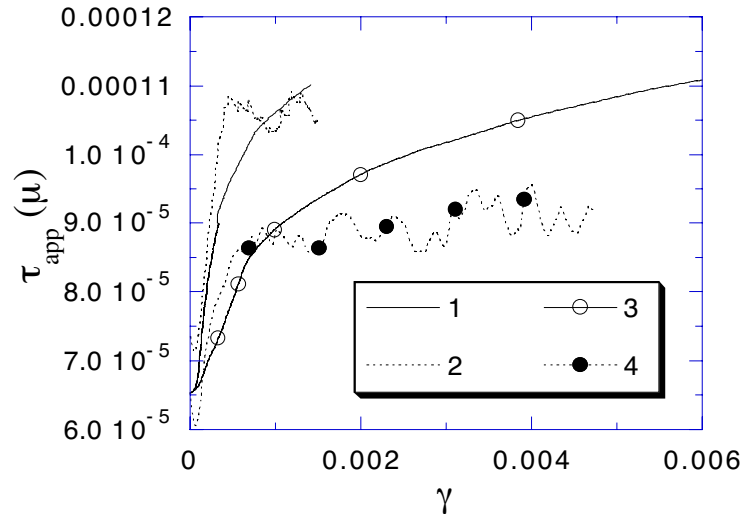


Fig. 61 : Courbes contrainte-déformation projetées calculées à partir de la simulation en 3-D. La contrainte est exprimée en unités du module de cisaillement  $\mu$ . La densité initiale de dislocations ( $4 \cdot 10^{11} m^{-2}$ ) est distribuée aléatoirement dans un volume de  $(15\mu m)^3$ . Les courbes 1 et 2 sont obtenues respectivement en vitesse de chargement imposé ( $d\sigma/dt = 5 \mu s^{-1}$ ) et en vitesse de déformation imposée ( $d\varepsilon/dt=15 s^{-1}$ ). Les courbes 3 et 4 correspondent aux mêmes conditions mais en l'absence de contrainte interne. Dans ce dernier cas il est possible d'atteindre des déformations plus importantes.

- Nous remarquons tous d'abord une différence importante de comportement au-delà de la limite élastique en fonction du mode de sollicitation. Pendant les essais à vitesse de chargement imposée, le durcissement d'écrouissage est relativement fort et tend vers une valeur de l'ordre de  $\mu/250$  vers la fin de la courbe 3. Ces courbes sont cependant données ici à titre indicatif. Comme indiqué plus haut, les vitesses de déformation correspondantes sont trop élevées pour que ces résultats puissent être considérés comme quantitatifs.

- A vitesse de déformation imposée, le taux de durcissement est comparativement plus faible. A chaque instant la contrainte appliquée s'ajuste pour maintenir une densité mobile suffisante pour fournir la déformation plastique imposée. Lorsque cette limite est atteinte les densités de dislocation mobile et totale deviennent quasi-constantes (figure 62). Le taux de durcissement est comparativement plus faible qu'en vitesse de chargement imposée, typiquement de l'ordre de  $10^{-3} \mu$ . Cette valeur est plus faible que ce que l'on

s'attendrait à obtenir en glissement multiple ( $\mu/200$ ). Nous revenons ci-dessous (§ 3) sur cette anomalie, en l'attribuant au fait que le glissement dévié n'est pas activé.

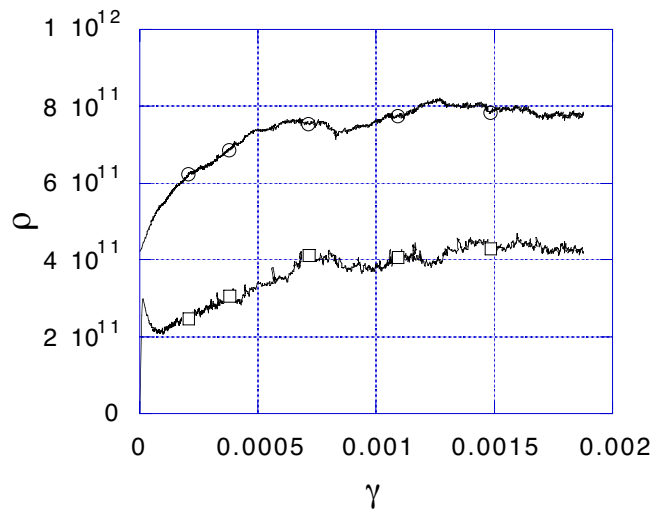


Fig. 62 : Variation de la densité de dislocations totale (marques rondes) et mobiles (marques carrées) au cours de déformation avec  $d\varepsilon/dt = 15 \text{ s}^{-1}$  (courbe 2 de la figure 61).

La vitesse de déformation imposée constitue naturellement le mode de sollicitation le mieux adapté, mais également le plus sensible aux instabilités de la dynamique des dislocations. Sur les courbes 2 et 4 de la figure 61, nous notons la présence d'oscillations temporelles importantes de la contrainte appliquée. Nous les interprétons comme un effet d'ancrage et de désancrage de la forêt au cours du temps, amplifié par les faibles dimensions du cristal simulé et par un module élastique apparent très élevé ( $M = 0.5\mu$ ). Lorsqu'une fraction importante des dislocations est ancrée par la forêt dans leur plan de glissement, et en l'absence de création de nouvelles sources de dislocations par double glissement dévié, la déformation plastique ne peut se poursuivre que par la destruction d'une partie des points d'ancrages. Alors, la résistance au glissement diminue jusqu'à ce que les obstacles soient reconstitués, c'est à dire pendant un intervalle de déformation correspondant à un libre parcours moyen pour toutes les dislocations mobiles.

- Si on supprime les interactions élastiques à grande distance, la contrainte d'écoulement diminue d'environ 20% et cet écart varie peu le long de la courbe de déformation (cf. figure 61, courbes 2 et 4). Malheureusement, le domaine où nous pouvons effectuer cette comparaison est très restreint car les déformations réalisables par les simulations intégrant l'effet de la contrainte interne sont faibles ( $\gamma \approx 0.2\%$ ). Lors de ces

simulations le temps de calcul des interactions élastiques varie comme le carré du nombre de segments de dislocations (Fig. 63).

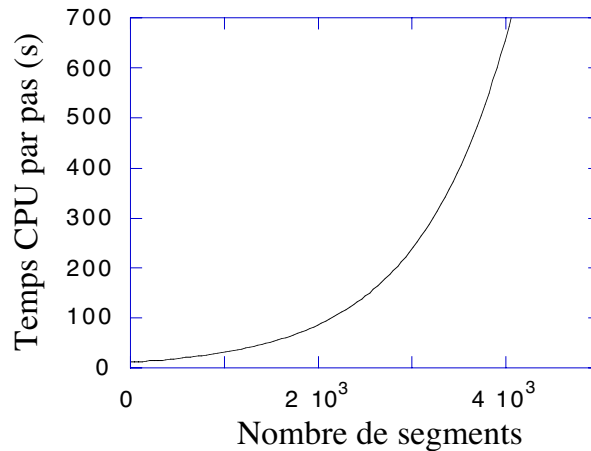


Fig. 63 : Variation du temps de calcul machine (CPU-IBM Risk6000/320H) en fonction du nombre de segments de dislocations du modèle "coin-vis" présents dans le cristal simulé. Une variation parabolique du temps de calcul est obtenue en l'absence de toute coupure des interactions élastiques à grande distance.

Cependant, il est remarquable de retrouver à 3-D une influence des interactions élastiques à grande distance très proche de celle prédite par le modèle de la forêt (Saada 1960). Nous avons également mentionné au chapitre II-4, que la tension de ligne représentait environ 80% des forces s'exerçant sur une source de Frank-Read isolée. Aux faibles déformations plastiques et en l'absence d'une forte organisation des dislocations, l'influence de la contrainte interne est homogène et quasi-constante en valeur relative. Elle s'oppose à l'écoulement plastique et translate les courbes contrainte-déformation de manière uniforme.

- La limite élastique est indépendante du mode de sollicitation (fig. 61) et vaut  $\tau_e \approx 10^{-4} \mu$ , soit 4.2 MPa, pour une densité mesurée de  $\rho \approx 7 \cdot 10^{11} \text{ m}^{-2}$ . Cette valeur concorde très bien avec celle mesurée sur des monocristaux de cuivre en glissement multiple, 4-5 MPa (cf. figure 2 pour un même densité).

## B. Influence de la stabilité des jonctions

Afin de compléter ces résultats et vérifier le rôle des interactions à courte distance entre dislocations nous avons fait varier le paramètre de la simulation ( $\tau_j$ ) qui contrôle la

stabilité des "jonctions attractives". Le durcissement de la forêt est ainsi artificiellement modifié. Ces variations de  $\tau_j$  sont restreintes à un domaine étroit dont les limites sont :

- pour des jonctions très stables le franchissement des arbres de la forêt par le mécanisme d'Orowan,
- pour des jonctions de faible stabilité, proches de la transparence, un régime d'écoulement plastique imposé par la cinétique de fonctionnement des sources de dislocations.

Sur la figure 64 sont représentées les variations de la limite élastique,  $\tau_e$ , mesurée sur les courbes simulées, en fonction de  $\tau_j$ . Tous ces essais ont été réalisés à partir d'une même configuration initiale, de densité  $4 \cdot 10^{11} \text{ m}^{-2}$  et avec une vitesse de déformation imposée  $d\varepsilon_{33}/dt = 15 \text{ s}^{-1}$ . L'influence de la contrainte interne étant la même d'une simulation à l'autre, nous n'avons pas introduit les interactions élastiques à longue distance. Nous obtenons une relation univoque entre la limite élastique et la contrainte critique de destruction des jonctions attractives qui confirme l'importance prépondérante de ce dernier paramètre.

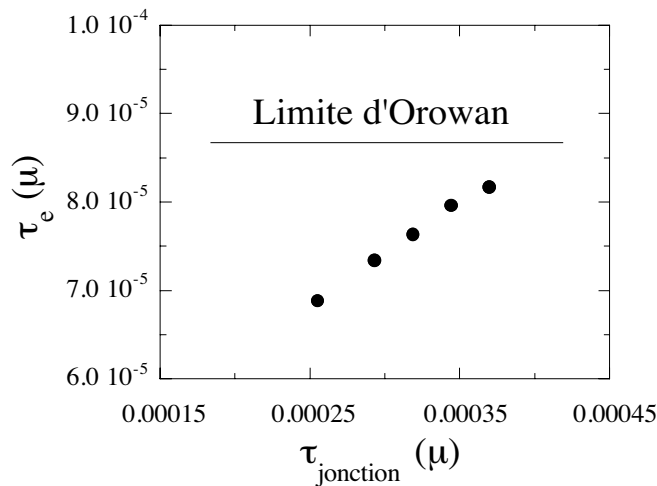


Fig. 64 : Variation de la limite élastique  $\tau_e$  en fonction de la contrainte de destruction des jonctions entre dislocations attractives  $\tau_j$  (en unités réduites). Lorsque la limite élastique atteint  $4 \cdot 10^{-4} \mu$ , on commence à observer le franchissement des arbres de la forêt par le mécanisme d'Orowan.

### C. Autres propriétés

Au-delà des courbes de déformation, ce sont toutes les propriétés mécaniques des monocristaux qui peuvent être reproduites par les simulations 3-D. Par exemple, les variations de la densité de dislocations au cours de la déformation, permettent de vérifier



au cours d'un seul essai l'expression de base du modèle de la forêt,  $\tau = \alpha\mu b\sqrt{\rho}$ . Cette relation ne peut malheureusement être testée que sur les courbes obtenues à vitesse de chargement imposée et en négligeant la contrainte interne (courbe 3 de la Fig. 61). Seul ce type d'essai permet, à l'heure actuelle, d'obtenir des plages de variation suffisantes pour effectuer cette vérification.

La figure 65-a montre les variations des densités totale et mobile au cours d'un tel essai. On note que la densité totale augmente deux fois plus vite que la densité mobile, et l'origine de cette augmentation ne peut donc uniquement être due au blocage des dislocations mobiles. Il y a nécessairement des segments ou des boucles immobiles créés, comme le prédit le modèle de Kocks (1966).

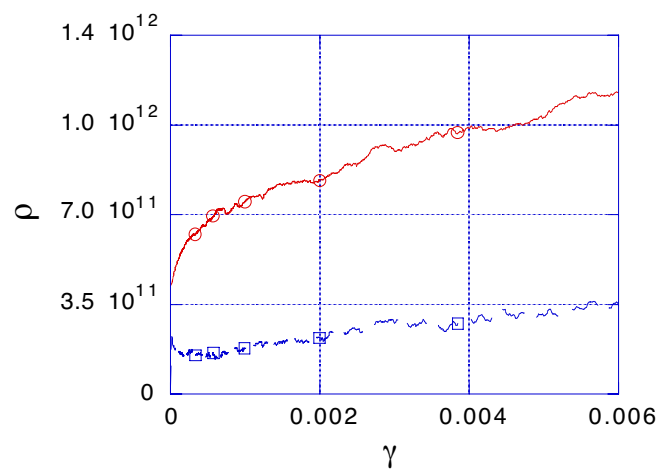


Fig. 65-a : Variation de la densité de dislocations totale (marques rondes) et mobiles (marques carrées) au cours d'une déformation avec  $d\sigma/dt = 5 \mu s^{-1}$ . Cette courbe est calculée à partir de simulations n'intégrant pas les effets de la contrainte interne, afin d'accroître le domaine de variation des densités.

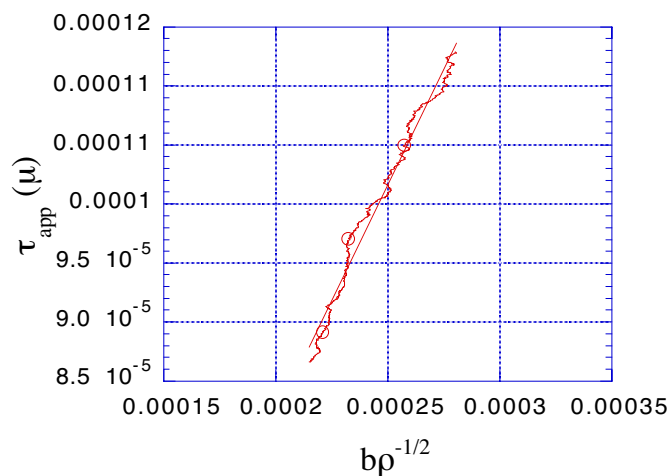


Fig 65-b : Variations de la contrainte appliquée en fonction de la densité totale de dislocations au cours de simulations en vitesse de chargement imposée (cf. figs. 61 et 64). La pente linéaire est égale à  $\alpha = 0.4$ .

Sur la figure 65-b, on voit que la relation linéaire entre la contrainte d'écoulement et la racine carrée de la densité totale de dislocations est vérifiée en l'absence de la contrainte interne. Le coefficient ainsi obtenu est  $\alpha \approx 0.4$ .

Sur les figures (66-A) et (66-B) sont reproduits les résultats de trois simulations de la déformation plastique réalisées dans les mêmes conditions de sollicitation ( $d\sigma/dt = 5\mu s^{-1}$ ) mais suivant des orientations différentes de la tension appliquée, [001], [111] et [112]. Nous vérifions que la limite d'écoulement plastique est indépendante de l'orientation. De plus, les taux de durcissement sont comparables sur les trois courbes et tendent vers une même valeur, de l'ordre de  $\theta = \mu/250$ . Ce résultat est en accord avec les observations effectuées sur monocristaux et qui montrent que les taux de durcissement sont identiques pour différentes directions de sollicitation de haute symétrie (Franciosi et Zaoui 1982, Neuhaus et Schwink 1982). En revanche, nous ne tirerons pas argument de la valeur numérique de  $\theta$ , compte tenu des remarques ci-dessus au sujet des essais en vitesse de chargement imposée.

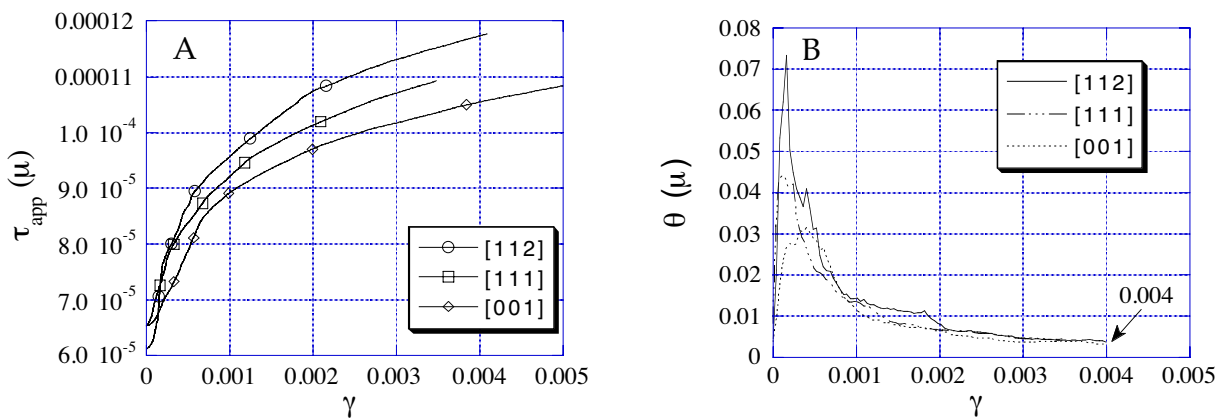


Fig. 66 : A - Courbes contrainte-déformation simulées pour trois orientations de l'axe de traction, [001], [111] et [112], à même vitesse de chargement imposée. B - Évolution du taux de durcissement  $\theta$ , calculé à partir des courbes précédentes.

Sur la figure 67, nous montrons que la vitesse moyenne des dislocations mobiles fluctue beaucoup au cours des simulations. Cette quantité est sensible à la nature discrète de la courbure des lignes de dislocation dans le modèle "coin-vis". Des déplacements rapides de segments peuvent être nécessaires pour accommoder un changement de courbure, mais ces déplacements peuvent se faire dans le sens de la contrainte appliquée aussi bien qu'en sens inverse. La vitesse moyenne des dislocations reste faible ( $\approx 1$  m/s) et compatible avec les hypothèses de notre modèle.

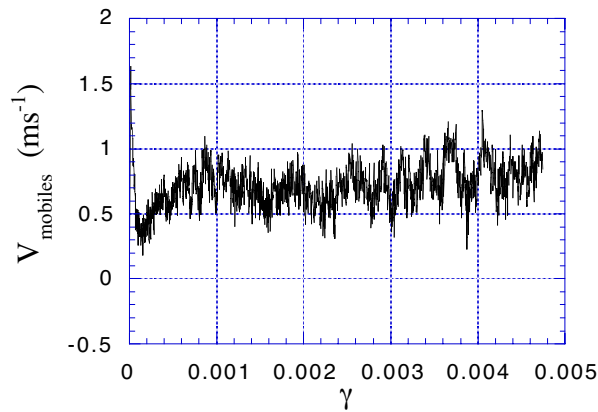


Fig. 67 : Fluctuations de la vitesse des segments de dislocations mobiles au cours de l'essai 4 de la figure 61.

On peut également extraire de la simulation d'autres quantités, moins souvent discutées, et qui nous renseignent sur des propriétés plus générales. Ainsi, la différence entre l'énergie mécanique injectée et le travail dissipé par pas de simulation définit l'énergie élastique stockée. Comme le montre la figure 68, cette dernière croît très lentement dans le domaine d'écoulement plastique lors d'essais à vitesse de déformation imposée ( $d\varepsilon_{33}/dt=15\text{ s}^{-1}$ ). De plus, la fraction d'énergie stockée par pas de simulation, de l'ordre de 45%, est beaucoup plus grande que celle attendue (on admet généralement de 10 à 20 %). Ce résultat est lié à un effet de taille : au cours de la simulation, une longueur importante de ligne de dislocation est annihilée en surface. Cette contribution est sensiblement réduite pour des modèles de taille plus importante. Ainsi, pour un monocristal de  $(30\mu\text{m})^3$  l'énergie stockée par pas de simulation est ramenée à 30%.

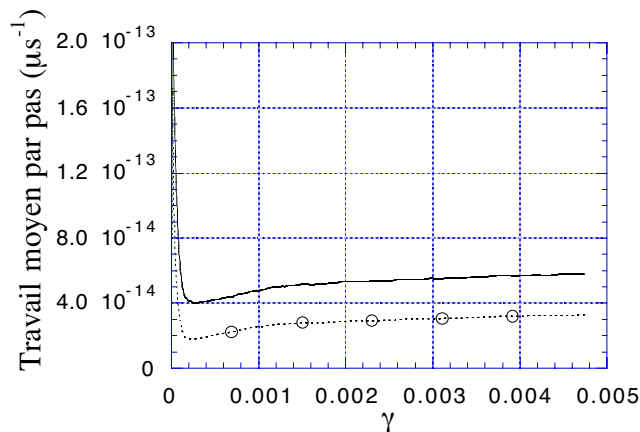


Fig. 68 : Variation de la puissance injectée (courbe continue) et du travail dissipé (courbe pointillée) moyens par pas de simulation ( $\delta t = 2 \cdot 10^{-9}\text{ s}$ ). La différence entre ces deux courbes est l'énergie élastique stockée dans le cristal par pas de simulation. Essai à vitesse de déformation imposée,  $d\varepsilon/dt = 15\text{ s}^{-1}$ .

En conclusion pour cette partie, les simulations de la plasticité en 3-D et à l'échelle mésoscopique permettent aujourd'hui de calculer les propriétés mécaniques associées à de faibles déformations plastiques ( $\gamma \approx 0.2 \%$ ). Un certain nombre de résultats obtenus sont en bon accord avec l'expérience. Ils montrent, en particulier, que l'influence des interactions élastiques à grande distance entre dislocations sur la limite d'écoulement plastique est faible (20 %) mais non négligeable, conformément aux prédictions du modèle de la forêt.

Dans des conditions de déformation multiple réalistes (c'est-à-dire avec une vitesse de déformation imposée pas trop élevée), le taux de durcissement est très faible car la densité de dislocations augmente lentement au cours de la déformation. Nous rappelons que dans tous les résultats que nous venons de décrire, le glissement dévié n'était pas activé, et la création de nouvelles sources de dislocations par le mécanisme de double glissement dévié est ainsi empêchée. Dans ces conditions, il est possible d'établir un régime de déformation, à faible durcissement puisque la densité de dislocations intersectée par chaque système de glissement augmente lentement.

L'influence essentielle du glissement dévié sur les mécanismes du durcissement plastique en glissement multiple, du moins à faible déformation est ainsi confirmée. Ce mécanisme est indispensable pour accroître le taux de multiplication des dislocations mobiles. Ce n'est naturellement pas son seul rôle, mais les déformations que nous considérons ne sont pas assez importantes pour que la restauration dynamique puisse jouer un rôle prépondérant. Une attention toute particulière doit donc être accordée au paramétrage de ce mécanisme élémentaire (cf. chapitre III-3), compte tenu de son influence sur le taux de durcissement lors des simulations en glissement multiple.

### V-3. RELATION ENTRE ÉCOULEMENT PLASTIQUE ET ORGANISATION DES DISLOCATIONS

Les résultats des simulations de la plasticité en 3-D, montrent que le durcissement dû au franchissement de la forêt est prédominant vis à vis des effets de contrainte interne. Nous examinons maintenant les possibilités d'émergence d'une microstructure dans le cadre de ce mécanisme.

Si on néglige le rôle joué par les interactions à grande distance (celles-ci sont cependant prises en compte dans toutes les simulations qui suivent), la dynamique des dislocations n'est plus contrôlée que par deux mécanismes (cf. Chapitre I).

- D'une part, un accroissement de la densité de dislocations et, donc, du nombre de points d'ancrages sur des lignes de dislocations mobiles (modèle de la forêt de Friedel-Saada).
- D'autre part, l'accumulation de boucles de dislocations concaves immobilisées dans leur plan de glissement devant des obstacles infranchissables. Ces boucles

résiduelles limitent la propagation des dislocations mobiles dans le même plan de glissement. C'est le modèle de Kocks dont nous avons déjà indiqué qu'il ne peut être évalué quantitativement.

Ces deux mécanismes sont souvent évoqués, séparément ou simultanément, pour expliquer l'accroissement de la densité de dislocations immobiles responsable du durcissement plastique.

### **A. Franchissement de la forêt par une dislocation isolée**

Au chapitre I, référence est faite aux simulations du glissement d'une ligne de dislocation à travers la forêt (simulations du type Foreman-Makin) réalisées par Jimenez (1982). Cet auteur montre que le mécanisme proposé par Kocks peut être soit reproduit, soit infirmé, suivant la "force" attribuée aux obstacles. C'est pourquoi ces expériences numériques n'ont pas permis d'identifier clairement l'origine du durcissement plastique.

Dans notre cas, le même problème peut être posé de manière différente. Au chapitre III-3, nous avons défini la force d'obstacle de la forêt, en attribuant à l'énergie des jonctions attractives la valeur  $\Delta U = 1,26 \mu b^2$  par unité de longueur.

Les paramètres de la simulation étant fixés, nous pouvons suivre le mouvement d'une ligne mobile se déplaçant à travers une distribution d'obstacles de la forêt. On a procédé comme suit : Une dislocation mobile de vecteur de Burgers  $1/2 [\bar{1} 0 1]$  est ancrée à une de ses extrémités dans le plan de glissement (111) passant par le centre du cube de simulation. L'autre extrémité débouche en surface, ce segment devant fonctionner sous contrainte comme une source spirale. Le volume simulé contient en outre une densité aléatoire de dislocations rectilignes et immobiles, de tous vecteurs de Burgers et toutes directions de lignes possibles. La source spirale voit donc dans son plan de glissement des arbres avec lesquels elle interagit suivant les règles établies pour les simulations en 3-D.

Une vitesse de déformation constante de  $0.05 \text{ s}^{-1}$  est imposée. La contrainte critique d'écoulement,  $\tau_e$ , est assimilée à la contrainte appliquée maximale atteinte au cours de la simulation. Celle-ci est arrêtée après trois tours de la ligne autour de son point d'ancrage.

La figure (69) montre un exemple de ces simulations. La source est ici ancrée près d'une surface du cristal afin d'accroître le nombre d'obstacles avec lesquels elle interagit simultanément. Les différentes portions de la ligne de dislocation avancent par sauts successifs rapides, comparés au temps d'immobilisation devant les arbres de la forêt. La durée d'immobilisation est contrôlée par les conditions de sollicitation qui imposent un

accroissement régulier de la contrainte pour maintenir la vitesse de déformation à la valeur imposée.

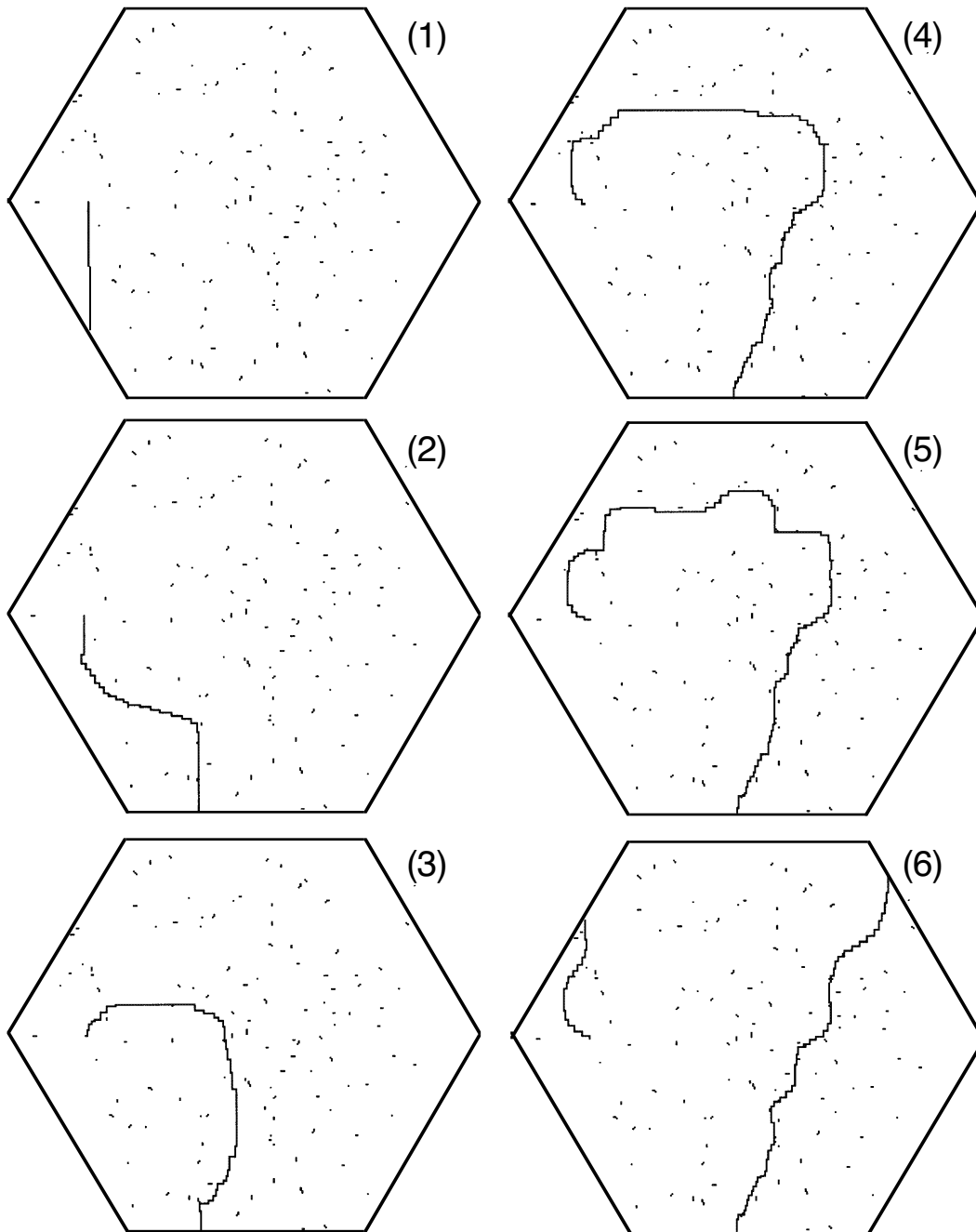


Fig. 69 : Simulation du mouvement d'une source spirale à travers la forêt. Une ligne de dislocation est ancrée dans un plan de glissement (111) situé au centre du monocristal 3D de côté  $15\mu\text{m}$ . Elle interagit avec une densité de dislocations rectilignes et immobiles vis ou coin de tous vecteurs de Burgers ( $\rho = 7,5 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$ ).

L'hypothèse de Kocks, d'une propagation privilégiée dans les régions de plus faible densité est partiellement vérifiée. Elle confère à la ligne un aspect "rugueux" (Fig. 69). Cependant, aucune boucle de dislocation n'est laissée dans le plan de glissement après rotation de la source. Ce résultat reste valable quelle que soit la densité de la forêt. Une

courbure concave des dislocations ancrées devant une fluctuation locale de résistance au glissement ne résiste jamais à l'effort conjoint de la tension de ligne, de la force appliquée et des interactions élastiques entre différentes parties de la ligne en vis à vis (Devincre et Kubin 1993).

La figure (70) rassemble les valeurs des contraintes critiques obtenues pour différentes configurations aléatoires de densité variable. Malgré une dispersion statistique imposée par la faible dimension du cristal simulé, la relation linéaire entre la contrainte d'écoulement et la racine carrée de la densité de la forêt est une fois de plus vérifiée. On obtient ainsi  $\alpha \approx 0,16$ , mais cette valeur est affectée par la grande incertitude sur la valeur de la densité dans l'aire de glissement.

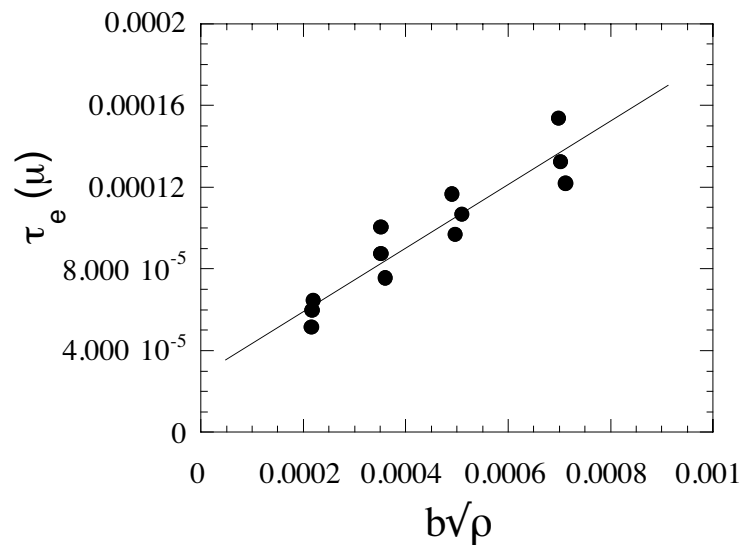


Fig. 70 : Contrainte critique d'écoulement,  $\tau_e$ , en fonction de la densité totale de dislocations en unités réduites ( $b\sqrt{\rho}$ ).

## B. Franchissement de la forêt en 3-D

Les résultats précédents se rapportent à une situation idéalisée qui n'est pas forcément celle rencontrée à trois dimensions. A 3-D, les arbres ne sont pas rectilignes et peuvent dans certain cas être mobiles. De plus, les dislocations non coplanaires en interaction ont tendance à se déformer, pour adopter des configurations localement parallèles ou orthogonales suivant que l'interaction est attractive ou répulsive. Enfin, il est difficile d'estimer la densité réelle de la forêt dans le plan de glissement et celle-ci n'est certainement pas distribuée de manière aléatoire. Néanmoins la conclusion essentielle obtenue ci-dessus, c'est-à-dire l'absence de boucles résiduelles dans les plans de glissement après franchissement de la forêt, est également vérifiée à 3-D.

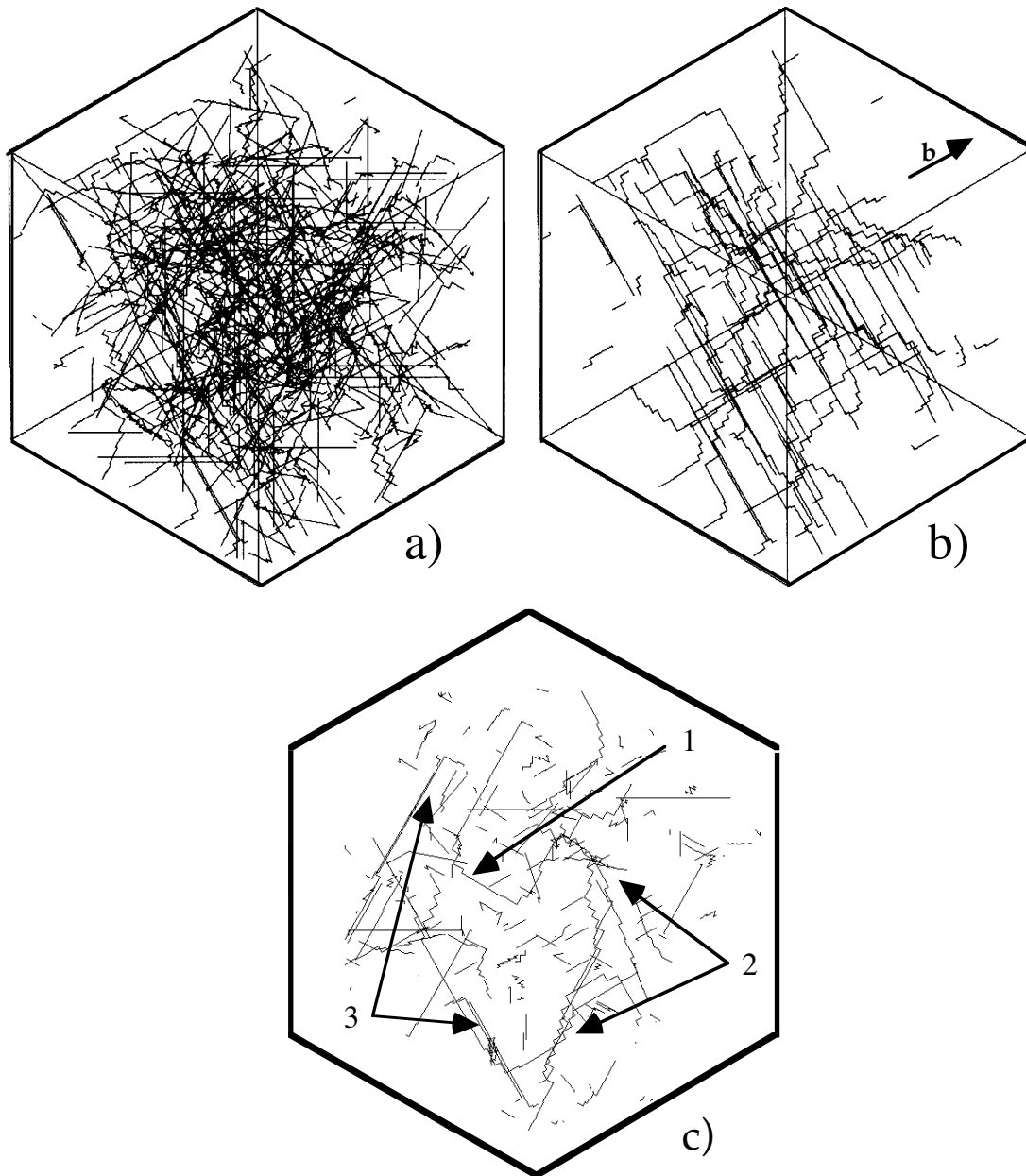


Fig. 71 : a) - Vue (111) du monocristal simulé après une déformation de 0,1% en vitesse de déformation imposée et en conditions de glissement multiple. La densité totale est de  $\rho \approx 8 \cdot 10^{11} \text{ m}^{-2}$

b) - Même configuration mais seules les dislocations de vecteur de Burgers  $1/2 [\bar{1} 0 1]$  sont visualisées. La forme des lignes de dislocation est comparable à celle obtenue sur la figure (69) avec une seule dislocation mobile à travers une forêt d'arbres immobiles.

c) - Lame mince dans la direction (111) de  $0,5 \mu\text{m}$  d'épaisseur du centre du monocristal de l'image a). Il apparaît en 1) Une source de dislocation glissant dans son plan de glissement et franchissant la forêt, en 2) des jonctions entre dislocations se réorientant dans une direction commune à leur plan d'intersection et en 3) des dipôles.

La figure 71-a montre une vue  $\langle 111 \rangle$  d'une configuration tridimensionnelle obtenue après une déformation plastique de l'ordre de 0,1% ( $\rho \approx 8 \cdot 10^{11} \text{ m}^{-2}$ ). Les conditions du glissement multiple sont les mêmes que celles utilisées au § 2 en vitesse de déformation



imposée. De cette image nous avons extrait un sous-ensemble de dislocations de même vecteur de Burgers (cf. figure 71-b). L'allure des lignes de dislocation mobiles en 3-D est comparable à celle obtenue sur la figure 69 avec une forêt immobile et on ne distingue pas de boucles isolées (cf. figure 71-b et 71-c). Sur la figure 71-b, un certain nombre de segments ont tendance, en projection, à s'aligner suivant des directions parallèles et à se regrouper. Ces segments ne sont pas situés dans les mêmes plans de glissement et constituent des sous-joints de faible extension qui s'avèrent être mobiles. Il y a donc un couplage entre sources de dislocations voisines. De même, sur la figure 71-c, l'ancrage de sources de dislocations par effet dipolaire et la formation de jonctions fortes étendues dans la direction d'intersection des plans de glissement actifs est clairement visible.

Comme nous l'avons déjà indiqué (cf. § 2), du fait que le glissement dévié n'est pas activé, seules les sources initiales contribuent à la multiplication. La densité totale de dislocations augmente, puis sature (cf. figure 62), sans laisser de boucles résiduelles. La longueur totale de ligne augmente sous l'effet de l'expansion des boucles mobiles produites et de leur tendance à prendre une forme "rugueuse" lors du franchissement de la forêt. Ce mécanisme sature au bout de 0,1 %, de déformation, lorsque chaque plan de glissement actif contient une ou deux boucles de dislocation, dont l'une a atteint la surface du cristal simulé. En l'absence d'obstacles au glissement suffisamment forts pour résister à des empilements de deux dislocations, la densité ne peut plus augmenter. De fait, nous avons vérifié sur les microstructures simulées l'absence d'empilements de dislocations.

Il est difficile d'invoquer seulement l'influence de la taille du cristal de simulation pour expliquer la saturation de la densité de dislocations au cours de nos calculs. En effet, le mécanisme de multiplication observé durant les premiers stades des simulations paraît, quoiqu'il arrive, insuffisant pour permettre un accroissement de la densité de dislocations de plusieurs ordres de grandeur comme cela est couramment observé. D'autre part, il est peu probable que la force d'obstacle associée à la forêt soit beaucoup plus élevée que la valeur que nous avons choisie. Enfin, il faudrait une hétérogénéité spatiale de la forêt beaucoup plus importante que celle réalisée au cours des simulations pour former des îlots infranchissables. Dans ces conditions, c'est l'absence de boucles de dislocation "résiduelles" qui est la cause de la saturation observée, fait que nous interprétons comme suit : Au cours de la déformation plastique, les contraintes locales au voisinage d'une intersection ou plus généralement d'une inhomogénéité de la densité de dislocation sont importantes et certainement suffisantes pour activer le glissement dévié. Celui-ci devrait alors contribuer à la formation de débris qui ne peuvent plus s'éliminer et restent dans le cristal. Dans ces conditions, on devrait observer une augmentation constante des densités immobile et totale ainsi qu'un accroissement du taux de durcissement (Devincre et Kubin 1993). C'est bien ce que montrent les premières simulations réalisées par G. Canova et L. Kubin (1993, communication privée).

#### V-4. SIMULATIONS EN 3-D : ORGANISATION MÉSOSCOPIQUE

Au cours de cette partie, nous discutons les mécanismes d'émergence d'une microstructure de dislocations en 3-D et dans des conditions aussi réalistes que possible. Il faut souligner que ce travail ne représente qu'une investigation préliminaire de la formation des microstructures tridimensionnelles. Pour un volume de cristal de  $(15\mu\text{m})^3$ , les densités de dislocations maximales que nous pouvons traiter correspondent à des contraintes de l'ordre de  $10^{-4} \mu$ . Si on admet a priori la loi d'échelle observée dans les CFC,  $\lambda = K\mu b/\tau$  avec  $K \approx 10$ , cela correspond à de cellules de diamètre  $\lambda \approx 25\mu\text{m}$ . Tout au plus pouvons-nous rechercher les stades précurseurs de l'auto-organisation. On peut également songer à choisir des conditions telles que le glissement dévié soit facile, comme dans le cas de l'aluminium, mais l'augmentation du taux de multiplication constitue alors un facteur défavorable.

Trois ingrédients semblent indispensables pour la formation d'une microstructure organisée. Tous trois peuvent, en principe, être pris en compte par les simulations.

- Le premier, qui s'inscrit dans le cadre du modèle de la forêt, est simplement la présence d'obstacles forts, liés à la formation de jonctions sessiles. Comme nous l'avons vu dans la partie précédente, ces obstacles doivent pouvoir conduire à un stockage de dislocations immobiles afin d'assurer une croissance continue de la densité totale.

- Le second ingrédient, bien qu'absent de nombreux modèles phénoménologiques, ne saurait être négligé, c'est le glissement dévié. Il est bien établi expérimentalement que son apparition coïncide avec la formation d'une structure cellulaire. Son influence est indispensable pour passer d'une organisation limitée dans quelques directions de l'espace à une véritable microstructure tridimensionnelle. On admet, en effet, que le glissement dévié attribue aux dislocations un nouveau degré de liberté, permettant ainsi une extension de la microstructure à tout l'espace. Au cours de nos simulations nous avons volontairement choisi des conditions où ce mécanisme n'était pas activé. Ce choix nous a été dicté par deux motivations, d'une part limiter l'accroissement de la densité de dislocations pour aller plus loin en déformation et, d'autre part, vérifier si, dans ces conditions, il est possible de former une microstructure tridimensionnelle. Dans le modèle de Kocks, par exemple, c'est la relaxation des contraintes locales par activation de glissements secondaires qui joue le rôle du glissement dévié.

• Le troisième ingrédient, est constitué par les interactions élastiques entre dislocations, c'est à dire la contrainte interne. Celle-ci est à l'origine des microstructures observées au cours des simulations à deux dimensions, mais ne conduit pas à la formation d'obstacles forts. On ignore si son influence reste significative en 3-D et si les interactions élastiques entre dislocations non-coplanaires jouent un rôle important. Cependant, il est clair qu'une organisation de la structure de dislocations s'accompagne d'une organisation spatiale du champ de contraintes internes. La question posée ici est donc celle de l'évolution spatiale couplée de deux quantités difficiles à relier entre elles. C'est pourquoi, les interactions élastiques ont été prises en compte dans les expériences numériques que nous décrivons ci-dessous.

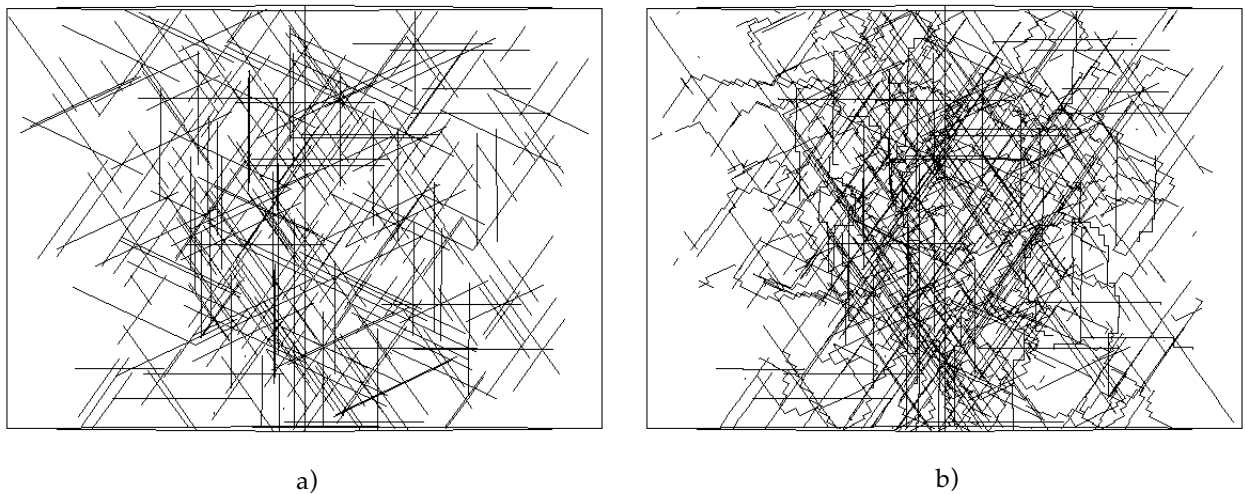


Fig. 72 : Vue  $[\bar{1}\bar{1}0]$  du cristal simulé.

a) Configuration initiale de densité  $\rho_i = 4 \cdot 10^{11} m^{-2}$ .

b) Après déformation.  $\gamma = 10^{-3}$ ,  $\rho = 8 \cdot 10^{11} m^{-2}$ .

La figure 72 montre, suivant une vue  $[\bar{1}\bar{1}0]$ , une configuration initiale et la configuration obtenue après une déformation simulée de 0.1 %, en conditions de glissement multiple suivant  $[001]$ . L'activité de deux plans de glissement particuliers,  $(111)$  et  $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ , est ainsi clairement mise en évidence car ils sont perpendiculaires au plan de l'image. La comparaison entre la microstructure initiale (figure 72-a) et son évolution ultérieure montre que certaines sources de dislocations situées dans des plans de glissement de faible facteur de Schmid n'ont pas fonctionné. D'autres ne sont pas activées du fait de leur interaction élastique défavorable avec des sources voisines.

La déformation plastique se concentre donc pour l'essentiel dans un petit nombre de plans de glissement plus ou moins régulièrement espacés. Nous retrouvons ici

l'équivalent des lignes de glissement observées en surface des éprouvettes déformées. Le glissement dévié n'étant pas actif, aucun élargissement de ces bandes de glissement n'est observé au cours des simulations.

On voit également sur la configuration de la figure (72-b) que les interactions entre dislocations mobiles de différents vecteurs de Burgers sont plus fréquentes dans les directions  $\langle 110 \rangle$  situées à l'intersection des systèmes de glissement actifs. Ces interactions se traduisent nécessairement par la formation de jonctions sessiles. Une conséquence de cette hétérogénéité du glissement est que la distribution des obstacles de la forêt dans un plan de glissement actif est elle-même très hétérogène, les dislocations de même caractère ayant, de plus, tendance à s'aligner suivant les directions d'intersection avec les autres systèmes. Contrairement à ce que suppose le modèle de Kocks, les obstacles forts ne sont donc pas distribués au hasard et ils présentent un début d'organisation spatiale qui pourrait constituer un germe pour la formation ultérieure de la microstructure. Cependant, comme nous l'avons indiqué plus haut, une condition importante est que ces obstacles forts ne soient pas franchis par les boucles mobiles ou détruits rapidement après leur formation.

En raison de l'augmentation de la densité de dislocations, il devient vite difficile de distinguer les hétérogénéités de distribution spatiale à l'intérieur du cube de simulation. Par analogie avec les techniques de microscopie électronique en transmission, nous examinons alors des lames minces extraites de la configuration globale.

La figure 73 montre l'exemple d'une telle lame, d'orientation (001) et d'épaisseur constante  $4\mu\text{m}$ . Cette structure spatiale est associée à une organisation du champ de contrainte interne, comme le montrent les figures 73-b et 73-c : nous observons une alternance de régions de contraintes internes opposées et dont les frontières sont définies par les zones denses de la microstructure. On note, par endroits que les zones blanches, où la contrainte interne est dans le sens de la contrainte appliquée, coïncident avec des murs embryonnaires. Ceux-ci présentent donc un caractère dipolaire (murs "polarisés"). Localement, la contrainte interne peut atteindre des valeurs considérables ( $10^{-3} \mu$ ), soit un ordre de grandeur de plus que la contrainte appliquée.

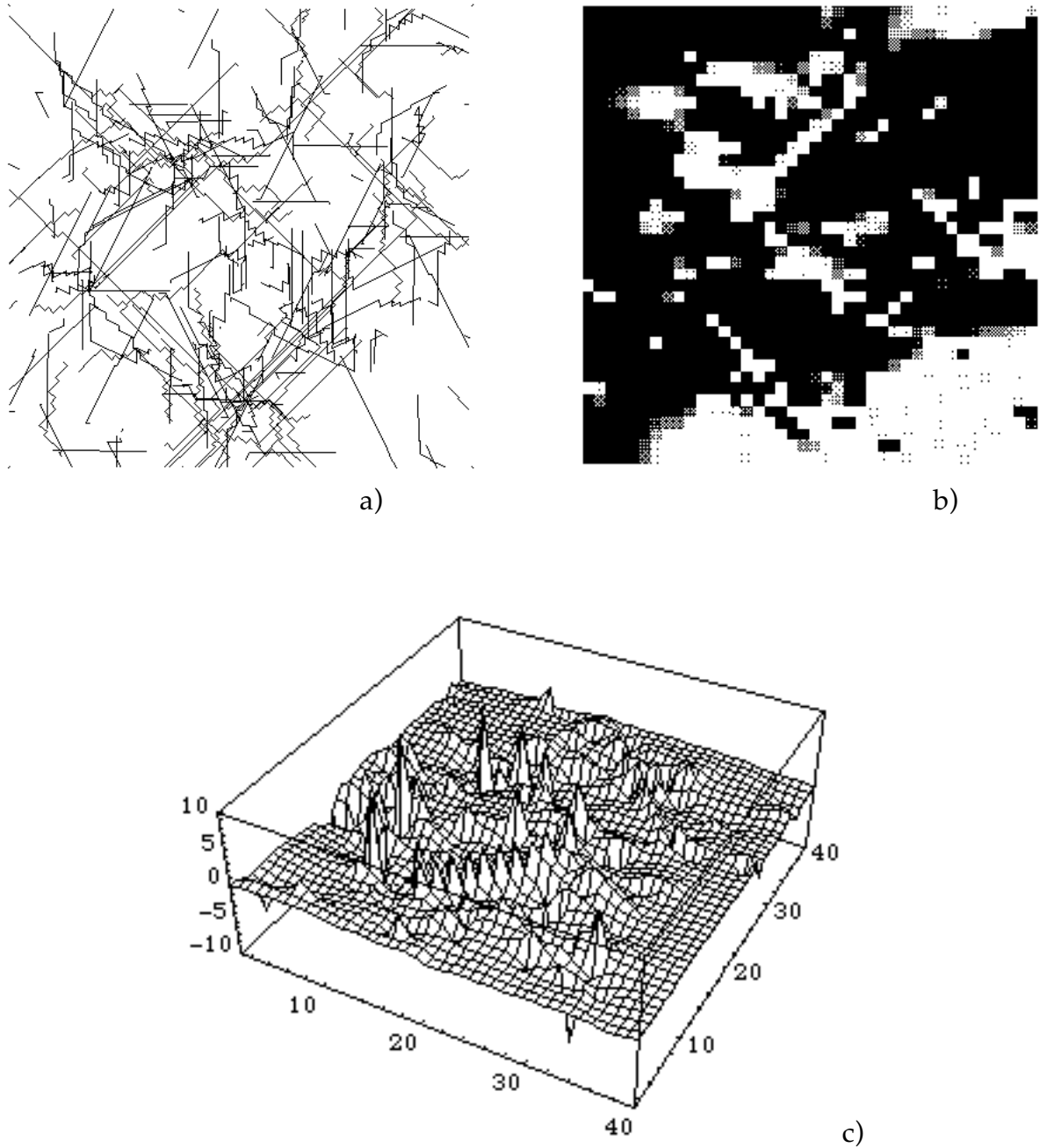


Fig. 73 : (a) Vue [010] d' une lame mince de  $4\mu\text{m}$  d'épaisseur après une déformation  $\gamma = 10^{-3}$ . (b) et (c) illustrent deux différentes représentations de la distribution des contraintes internes  $\sigma_{zz}$  à l'intérieur de cette lame mince. Sur la figure (b) le spectre de densité allant du blanc au noir correspond respectivement aux régions de contraintes internes positives et négatives. La figure (c) est l'équivalent tridimensionnel de (b). Les variations de la contrainte interne, calculée sur  $40 \times 40$  noeuds du réseau de simulation au centre de la lame, sont représentées dans la direction normale au plan en unités de  $10^{-4} \mu$ .

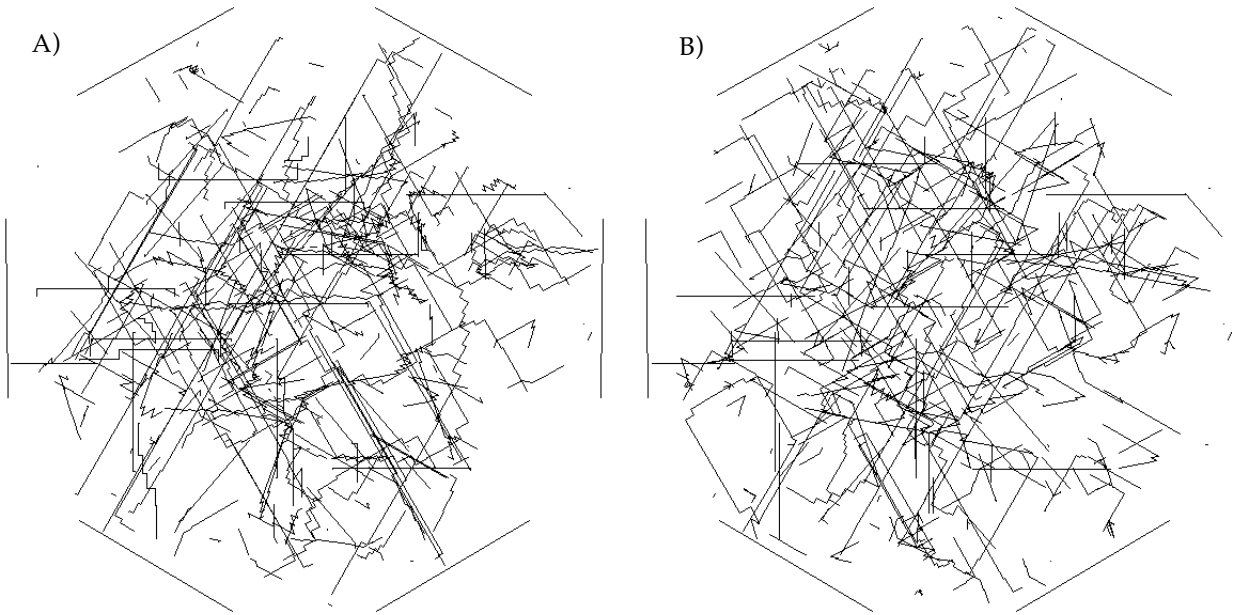


Fig. 74 : Lames minces (111) de  $4\mu\text{m}$  d'épaisseur après une déformation  $\gamma = 10^{-3}$ . L'image A) est issue d'une simulation prenant en compte les interactions élastiques, L'image B) est réalisée dans les mêmes conditions mais sans interactions élastiques.

Afin de tester l'influence des interactions élastiques, nous avons comparé deux lames minces extraites d'un même système après deux essais simulés réalisés dans les mêmes conditions (figure 74), excepté que dans le second (fig. 74-b) les interactions élastiques à grande distance ne sont pas calculées et seule la tension de ligne est prise en compte. La comparaison des deux microstructures montre nettement que, dans ce dernier cas, la distribution spatiale des dislocations est plus homogène. Plus précisément, s'il y a toujours des jonctions attractives, les points d'accumulation des dislocations ne s'étendent pas pour former des embryons de murs. Ainsi, la probabilité de blocage d'autres dislocations autour d'une première jonction, avant que celle-ci ne soit détruite, semble plus faible. De même, les structures polarisées que nous avons observées précédemment sont absentes.

Un effet important des interactions élastiques à longue portée consisterait donc à favoriser une réorganisation locale des dislocations, en accord avec les résultats des simulations en 2-D. En effet, deux dislocations coplanaires en interaction tendent localement à se déformer de manière à être, soit parallèles, soit orthogonales, selon que l'interaction est attractive ou répulsive. Le gain d'énergie élastique correspondant apporte une contribution supplémentaire à la stabilité des jonctions. De plus, lorsque les configurations sessiles deviennent complexes, leur contrainte à longue distance est loin d'être négligeable. Au vu de ces résultats, il paraît peu probable, qu'une microstructure organisée puisse être réalisée en l'absence d'interactions élastiques à grande distance.

## V-5. CONCLUSION

Nous avons montré que les simulations de la dynamique des dislocations en 3-D permettent de reproduire un certain nombre de propriétés essentielles de la déformation plastique. L'étude de la dynamique des lignes de dislocation montre que, à faible déformation, la densité totale augmente non pas, par formation de "débris" dans les plans de glissement, mais sous l'effet de la multiplication et de l'expansion des boucles de dislocations. Cette conclusion n'est toutefois valable qu'en l'absence de glissement dévié.

Les densités de dislocations que nous pouvons atteindre sont trop faibles pour que nous puissions observer des microstructures tridimensionnelles nettement organisées. On peut cependant extraire des simulations actuelles des informations intéressantes. Ainsi, l'accumulation locale des dislocations est favorisée par les interactions élastiques à grande distance. Elle se produit à l'intersection de deux plans de glissement actifs, suivant des directions  $\langle 110 \rangle$ . Cette hétérogénéité spatiale est susceptible de constituer les points d'ancrage, germes de la formation d'une microstructure. Celle-ci serait alors stabilisée, soit par le glissement dévié des dislocations arrivant devant ces barrières de contrainte interne, soit par le mécanisme de formation de boucles résiduelles proposé par Kocks. Plus probablement, on peut invoquer l'addition de ces deux mécanismes. Chaque fois qu'une dislocation vis dévie pour éviter une barrière de contrainte interne dans son plan de glissement, elle favorise l'accumulation devant cette même barrière de segments immobiles et difficiles à recombinaison.





**CONCLUSION GÉNÉRALE  
ET  
PROSPECTIVE**



## CONCLUSION GÉNÉRALE ET PROSPECTIVE

Au cours de cette étude, en nous inspirant des travaux antérieurs, nous avons mis en place, validé et exploité une simulation de la dynamique des dislocations à deux et trois dimensions. Les résultats présentés dans ce mémoire prouvent la faisabilité d'une modélisation des propriétés collectives des dislocations à l'échelle mésoscopique.

La nouvelle technique de simulation mise au point intègre de façon explicite l'influence du temps au cours de la dynamique des dislocations. Le déplacement des segments de dislocation est résolu de manière simultanée sur la densité totale de dislocations. Cette procédure lève toute ambiguïté sur la définition du temps physique et s'adapte bien aux exigences algorithmiques des ordinateurs modernes.

La simulation est basée sur une discrétisation de l'espace qui permet de prendre en compte la géométrie du glissement, celle des métaux CFC dans le cas présent. Les propriétés élémentaires essentielles des dislocations ont été introduites et discutées. En particulier, nous avons montré que les propriétés statiques du modèle de dislocation "coin-vis" élaboré pour ces simulations concordent bien avec les prédictions de la théorie élastique des dislocations. Nous avons également apporté une attention particulière à la description de phénomènes complexes, comme la formation et la destruction des jonctions attractives ou le glissement dévié, qui mettent en jeu des paramètres du matériau, ou encore la force image au voisinage des surfaces des cristaux simulés.

Les simulations à deux dimensions, qui excluent topologiquement les réactions entre dislocations à courte distance, permettent de reproduire dans des conditions facilement interprétables l'émergence d'une microstructure organisée.

Si on se limite à un seul système de glissement, l'organisation spatiale des dislocations est un phénomène purement dynamique apparaissant en présence d'une contrainte appliquée. L'étude des propriétés collectives des dislocations permet alors l'élaboration d'un modèle phénoménologique prédisant les lois d'échelle des microstructures en fonction des paramètres de la simulation.

L'addition d'un second système de glissement favorise l'émergence de structures plus complexes. Les configurations observées ne sont plus unidimensionnelles (murs de dislocation dipolaires) mais sont constituées de cellules bidimensionnelles de plus grande stabilité.

Dans les deux cas, la formation d'une microstructure est contrôlée par des mécanismes d'interactions élastiques entre dislocations voisines : formation et destruction de dipôles, formation de sous-joints, ancrage de la microstructure par des interactions fortes entre dislocations voisines de différents vecteurs de Burgers.

Ces résultats nous permettent de considérer comme raisonnablement bien comprises les questions qui se posaient encore à propos de l'interprétation des configurations formées lors des simulations à deux dimensions.

Les simulations de la plasticité à trois dimensions sont beaucoup plus complexes mais, en contrepartie, elles sont bien plus réalistes. Les propriétés mécaniques ainsi obtenues sont, en principe, directement comparables avec l'expérience. Cependant, les déformations plastiques que nous pouvons atteindre à ce jour ne dépassent pas quelques  $10^{-3}$ . Cette limitation provient de l'augmentation de la densité de dislocations en cours de déformation et du nombre croissant d'interactions élastiques à prendre en compte. Le problème de la longue portée des interactions, qui constitue la pierre d'achoppement de tous les modèles collectifs de dislocations, se retrouve donc également à notre niveau.

Pour la première fois, cependant, les aspects fondamentaux de la plasticité ont pu être abordés par le moyen d'une simulation tridimensionnelle. Notre étude a permis de mettre en évidence un certain nombre de résultats préliminaires mais significatifs, sur des cristaux modèles dont la dimension est de  $(15 \mu\text{m})^3$  :

- Nous avons vérifié qu'aux faibles déformations plastiques la contribution de la contrainte interne à la contrainte d'écoulement est faible mais non négligeable ( $\approx 20\%$ ), en accord avec les prédictions théoriques antérieures.

- Au cours des simulations en conditions de glissement multiple, mais en l'absence de glissement dévié, le durcissement plastique observé est bien décrit par le modèle de la forêt. Inversement, le mécanisme de boucles résiduelles concaves proposé par Kocks pour décrire le durcissement plastique et l'émergence d'une microstructure tridimensionnelle n'est pas vérifié. L'interprétation de ces résultats met l'accent sur le fait que de nouvelles sources de dislocations ne peuvent pas être créées par double glissement dévié. Cela entraîne un déficit de multiplication et une saturation du durcissement plastique.

- Les simulations tridimensionnelles permettent de reproduire les stades précurseurs de la formation d'une microstructure organisée. L'accumulation des dislocations immobiles se fait préférentiellement à l'intersection des systèmes de glissement actifs où les obstacles de la forêt sont les plus denses.

- L'ensemble de ces résultats nous amène à suggérer des modifications au modèle de Kocks en vue de traiter de manière plus réaliste les relations entre microstructure et durcissement d'écrouissage en glissement multiple. L'existence d'une forte contrainte interne dans les régions d'accumulation des obstacles de la forêt doit permettre d'activer le glissement dévié. Il en résulte à la fois la création de nouvelles sources de dislocations et la stabilisation des débris et boucles résiduelles. L'hétérogénéité de la distribution spatiale

des dislocations peut alors s'amplifier, conduisant à la formation d'une structure cellulaire.

Pour être contrôlés sans équivoque, ces résultats et ces hypothèses sur le mécanisme de formation des microstructures de dislocations, nécessitent l'accès à des déformations plus importantes que celle utilisées durant notre étude. La mise en place de moyens de calcul plus puissants devrait nous permettre, dans un avenir proche, d'étendre largement le domaine d'application de la simulation. En parallèle, l'efficacité du programme numérique est susceptible d'être notablement améliorée. Par exemple, l'adaptation dans notre cas d'un algorithme approprié, permettra de réduire de  $N^2$  à  $N \log N$  le nombre d'interactions de paires à calculer pour  $N$  segments.

Les perspectives de ce travail sont nombreuses et vont au-delà de l'étude de la formation des microstructures. Par une démarche analogue à celle qu'a suivie la théorie des dislocations il devient possible, une fois que les mécanismes de base sont validés, de passer à l'étude de situations plus complexes.

Nous distinguons trois thèmes principaux:

- La simulation du comportement plastique de monocristaux de cuivre et d'aluminium avec des déformations de l'ordre du pour-cent doit nous permettre d'approcher plus efficacement la question de l'auto-écrantage des microstructures, de la structure spatiale de la contrainte interne et des longueurs d'ondes caractéristiques associées soit à des configurations cellulaires soit à des Bandes de Glissement Persistantes. L'examen de la contrainte interne mésoscopique doit également avoir pour but la compréhension de la contrainte interne macroscopique, par exemple à travers une étude de l'effet Bauschinger. Enfin, notre travail s'étant limité à l'étude de propriétés au voisinage de la température ambiante, il reste à inclure les mécanismes de montée afin de pouvoir traiter la plasticité de moyenne température.

- La microstructure initiale du cristal simulé pourra s'éloigner de celle du matériau modèle pour se rapprocher de celle des matériaux réels. Par exemple, il sera possible de tenir compte de la présence de petits précipités cohérents ou incohérents, d'un ordre à courte ou longue distance, ou de traiter un matériau contenant des interfaces. Dans ce dernier cas, deux voies se dégagent : - l'étude de l'influence d'un joint de grain "mésoscopique" sur la plasticité cristalline, - les mécanismes de nucléation et de propagation des dislocations dans les couches minces épitaxiées.

- Le dernier thème constitue une tentative de jonction avec la micromécanique des milieux continus. Dans ce cas, les deux atouts principaux de la simulation

tridimensionnelle sont de pouvoir traiter contraintes et déformations sous forme tensorielle et de pouvoir inclure à la fois des propriétés élastiques et des propriétés plastiques. Parmi les questions classiques qu'il serait possible d'aborder, on peut citer l'équivalence entre déformation uniaxiale et sollicitations complexes, les effets d'un changement de chemin de déformation, la définition des surfaces de charge et les instabilités plastiques. Actuellement, un problème particulier suscite beaucoup d'intérêt et nous entreprenons de l'examiner : Il s'agit de la propagation des fissures dans un milieu ductile et de la définition cohérente d'une ténacité en relation avec la transition fragile-ductile. Il serait alors possible d'intégrer à la fois les effets mécaniques des contraintes en tête de fissure et les effets métallurgiques liés à l'existence d'une zone plastique et à l'émission ou absorption de dislocations par la fissure.

# **ANNEXES**





## ANNEXE I : Expression du tenseur de contrainte d'un segment de dislocation rectiligne

D'après de Wit (1967) l'équation (12) du chapitre II s'écrit:

$$q = \int \mathbf{R} \cdot d\mathbf{l} = -\frac{1}{2} \rho^2 \left( \ln(L + R) - \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} LR \quad (\text{A1})$$

A partir de cette expression il est possible de calculer la dérivée seconde de q:

$$q_{,ij} = -(\delta_{ij} - t_i t_j) \ln(L + R) - \frac{\rho_i t_j + \rho_j t_i + L t_i t_j}{R} - \frac{\rho_i \rho_j}{R(L + R)} \quad (\text{A2})$$

ainsi que ses dérivées d'ordre trois :

$$q_{,mqq} = -2 \frac{Y_m}{R(L + R)} \quad (\text{A3})$$

avec

$$\varepsilon_{kmn} t_n t_m = (\mathbf{t} \times \mathbf{t}) = 0 \quad (\text{A4})$$

et une expression générale de la forme

$$q_{,ijm} = -\rho_{i,j} \frac{(R_m + R t_m)}{R(L + R)} - \frac{(\delta_{im} t_j + \delta_{jm} t_i)}{R} + \frac{(\rho_i t_j + \rho_j t_i + L t_i t_j)}{R^3} \rho_m - \frac{\delta_{im} \rho_j + \rho_i \rho_{j,m}}{R(L + R)} + \frac{\rho_i \rho_j}{R^2 (L + R)^2} \rho_m \left( 2 + \frac{L}{R} \right) \quad (\text{A5})$$

A l'aide des expressions (A3) et (A5), il est maintenant possible de développer l'expression initiale du tenseur des contraintes de de Wit (eq. 7). L'écriture de cette dernière expression est sensiblement simplifiée en utilisant l'opérateur tensoriel donné dans le texte (eq. 17) ainsi que le produit mixte  $(\mathbf{b}, \rho, \mathbf{t})$ . On obtient alors (Devincre et Condat 1992) :

$$\sigma_{ij} = \frac{\mu}{4\pi R(L+R)} \left( \begin{array}{c} (\mathbf{b} \times \mathbf{Y})_i t_j + (\mathbf{b} \times \mathbf{Y})_j t_i - \frac{1}{(1-\nu)} \left( (\mathbf{b} \times \mathbf{t})_i Y_j + (\mathbf{b} \times \mathbf{t})_j Y_i \right) \\ - \frac{(\mathbf{b}, \boldsymbol{\rho}, \mathbf{t})}{(1-\nu)} \left( \delta_{ij} + t_i t_j + \frac{(\rho_i t_j + \rho_j t_i + L t_i t_j)(L+R)}{R^2} + \frac{\rho_i \rho_j \left( 2 + \frac{L}{R} \right)}{R(L+R)} \right) \end{array} \right) \quad (\text{A6})$$

Finalemment l'équation (15) sous sa forme simplifiée est obtenue à l'aide de l'équation (A6) et des deux relations suivantes :

$$(\mathbf{b}, \boldsymbol{\rho}, \mathbf{t}) = (\mathbf{b}, \mathbf{Y}, \mathbf{t}) \quad (\text{A7})$$

et

$$Y^2 = 2L(L+R) \quad (\text{A8})$$

## ANNEXE II : Résolution des équations du mouvement par glissement

Nous avons vu au chapitre III que de manière phénoménologique, l'équation du mouvement d'une dislocation se met sous la forme :

$$m\dot{v} = -Bv + \tau^* b, \quad (\text{A9})$$

où  $m$  est l'inertie par unité de longueur de la ligne de dislocation,  $\tau^*$  la contrainte effective et  $B$  un coefficient d'amortissement visqueux. L'équation vectorielle initiale peut être ramenée à une simple équation différentielle scalaire, les dislocations ne pouvant se déplacer que normalement à leur ligne et dans leur plan de glissement. Cette expression est identique à une équation de Langevin qui définit le mouvement d'une particule dans un fluide visqueux.

Par intégrations successives de l'équation (A9) nous obtenons une expression de la vitesse et du déplacement au cours du temps.

$$\dot{v} + \xi v = \frac{F_0}{m} \quad (\text{A10})$$

avec  $\xi = \frac{B}{m}$  et  $F_0 = \tau^* b$ .

La solution de l'équation (A10) est une combinaison linéaire de la solution homogène et d'une solution particulière :

$$v = \frac{F_0}{m\xi} \quad \text{et} \quad v(t) = Ce^{-\xi t}. \quad (\text{A11})$$

Soit la solution générale de la forme :

$$v(t) = \frac{F_0}{m\xi} + Ce^{-\xi t}. \quad (\text{A12})$$

En intégrant cette équation on trouve finalement :

$$r(t) = \frac{F_0}{m\xi} t - \frac{C}{\xi} e^{-\xi t}. \quad (\text{A13})$$

Si l'on suppose que la vitesse,  $v(t)$ , du système est connue à un instant  $t$ , on peut calculer la constante d'intégration  $C$  et en déduire la vitesse et le déplacement à tout instant  $t+\delta t$  pourvu que la force exercée reste quasi-constante au cours de l'intervalle de temps  $\delta t$ :

$$C = \left( v(t) - \frac{F_0}{m\xi} \right) e^{\xi t}. \quad (A14)$$

Soit

$$\left| \begin{array}{l} r(t + \delta t) = r(t) + C_1 \delta t v(t) + C_2 \delta t^2 a(t) + \delta r \\ v(t + \delta t) = C_0 v(t) + C_1 \delta t a(t) + \delta v \end{array} \right. \quad (A15)$$

avec

$$\left| \begin{array}{l} a(t) = \frac{F_0}{m} \\ C_0 = e^{-\xi \delta t} \\ C_1 = (\xi \delta t)^{-1} (1 - C_0) \\ C_2 = (\xi \delta t)^{-1} (1 - C_1). \end{array} \right. \quad (A16)$$

Un calcul dimensionnel de la masse linéique d'une dislocation permet de vérifier que l'effet inertiel contenu dans les équations (A15) est négligeable pour le pas de temps  $\delta t$  de la simulation. Pour une dislocation subsonique on estime la masse d'une dislocation égale à environ (Wertmann et Wertmann 1980) :

$$m = \frac{E_0}{C_t^2} \quad (A17)$$

où  $E_0 \approx \mu b^2$  est l'énergie élastique de l'unité de longueur de dislocation,  $C_t \approx (\mu/\rho)^{-1/2}$  la vitesse transversale du son dans un cristal (Hirth et Lothe 1982) et  $\rho$  la densité du matériau. Ainsi, pour une dislocation parfaite dans du cuivre

$$m \approx 4,6 \cdot 10^{-16} \text{ Kg/m} \quad (A18)$$

et

$$\xi = B/m \approx 10^{11}. \quad (A19)$$

Le coefficient d'amortissement visqueux,  $B$ , est dans le cuivre de l'ordre de  $5 \cdot 10^{-5}$  Pa.s (Philibert 1979).

On vérifie ainsi pour un pas de temps de  $\delta t = 10^{-9}$ s que :

$$\left| \begin{array}{l} C_0 \approx 0 \\ C_1 \approx C_2 \end{array} \right. \quad (A20)$$

Alors, les expressions (A15) se simplifient sous la forme donnée au chapitre III-1 :

$$\left| \begin{array}{l} v(t + \delta t) = \frac{\tau^*(t) \cdot b}{B} \\ r(t + \delta t) = r(t) + \delta t \cdot v(t). \end{array} \right. \quad (A21)$$



## ANNEXE III : Paramètres d'entrée de la simulation

- **Conditions de discrétisation**

- \* Paramètre de maille du réseau de simulation

$$a = 5,54 \text{ nm}$$

- \* Volume du cristal simulé

$$V = (6000\text{\AA})^3$$

- \* Pas de temps pour la résolution des équations du mouvement

$$\delta t = 2 \cdot 10^{-9} \text{ s}$$

- **Paramètres adoptés pour reproduire les propriétés du monocristal de cuivre**

- \* Constantes élastiques

$$\mu = 42 \text{ GPa}, \quad \nu = 0,324$$

- \* Module du vecteur de Burgers

$$b = 0,255 \text{ nm}$$

- \* Coefficient de frottement visqueux

$$B = 5 \cdot 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$$

- \* Paramètres du glissement dévié (à la température ambiante  $T = 300 \text{ K}$ )

- Volume d'activation:  $\mathbf{V} = 300 b^3$

- Contrainte critique de début de stade III:  $\tau_{III} = 25 \text{ MPa}$

- Rapport des contraintes projetées entre le plan de glissement et le plan de déviation:  $\chi = 1,6$

- **Conditions de sollicitation**

- \* Vitesse de chargement

$$\dot{\sigma} = 5\mu \text{ s}^{-1}$$

- \* Vitesse de déformation

$$\dot{\varepsilon} = 15 \text{ s}^{-1}$$

- \* Module élastique équivalent

$$M = 0,5 \mu$$





# **RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES**



## RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- Aifantis E.C., *Mat. Sci. Eng.*, **81**, 563 (1986)
- Allen M.P. et Tildesley D.J., "Computer simulation of liquids", Clarendon Press, Oxford (1991)
- Amodeo R.J. et Ghoniem N.M., *Phys. Rev B*, **41**, 6968 (1989)
- Bacon D.J. et Crocker A.G., *Phil. Mag.*, **12**, 195 (1965)
- Bacon D.J., Barnett D.M. et Scattergood R.O., *Progress in Materials Science*, **23**, 51 (1979)
- Bacon D.J., Kocks U.F. et Scattergood R.O., *Phil. Mag.*, **28**, 1241 (1973)
- Bacon D.J., *Phys. Stat. Sol.*, **23**, 527 (1967)
- Barioz C., Rapport de DEA, ENSEEG, Grenoble (1991)
- Barnett D.M., Asaro R.J., Gavazza S.D., Bacon D.J. and Scattergood R.O., *J. Phys. F : Metal Phys.*, **2**, 854 (1972)
- Basinski S.J. et Basinski Z.S., p. 261 dans "Dislocations in Solids", vol. 4 : Nabarro F.R.N. (Ed.). Amsterdam : North Holland (1979)
- Bonneville J., Escaig B. et Martin J.L., *Acta Metall.*, **36**, 1989 (1988)
- Bonneville J., Thèse, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, (1985)
- Bouchaud E. et Bouchaud J.P., *Phil. Mag. Letters*, **65**, 339 (1992)
- Brown L. M., *Phil. Mag.*, **10**, 441 (1964)
- Burgers J.M., *Proc. Acad. Sci. Amsterdam*, **42**, 293 et 278 (1939)
- Cagnon M., "Théorie de l'activation thermique" dans "Dislocations et Deformation Plastique" : Yrivals 1979, Eds. Groh P., L.P. Kubin et J.L. Martin, Les éditions de Physique (1979)
- Condat M., *Phys. Stat. Sol.*, (a) **40**, K183 (1977)
- Cotterill R.M.J., *Phys. Lett. A*, **60**, 61 (1977)
- Cottrell A.H., "Dislocations and Plastic flow", Oxford University Press (1953)
- d'Humières D. et Lallemand P., *Physica*, **140A**, 326 (1986)
- de Wit R. et Koehler J.S., *Phys. Rev.*, **116**, 1113 (1959)
- de Wit R., *Phys. Stat. Sol.*, **20**, 567 (1967)
- de Wit R., *Phys. Stat. Sol.*, **20**, 575 (1967)
- Devincre B. et Condat M., *Acta Metall. Mater.*, **40**, 2629 (1992)
- Devincre B. et Kubin L.P., *Modelling and Simulations in Materials Science*, sous presse (1993)
- Devincre B. et Pontikis V., *Mater. Res. Symp. Proc.*, **291**, Materials Research Society (1993)
- Devincre B., Pontikis V., Bréchet Y., Canova G., Condat M. et Kubin L., dans "Microscopic Simulations of Complex Hydrodynamic Phenomena", Ed. Mareschal M. et Holian B.L., Plenum Press, New York (1992)
- Duesbery M.S. et Richardson G. Y., *Solid State and Materials Sciences*, **17**, 1 (1991)

- Éléments de métallurgie physique Vol. 5, 2<sup>ème</sup> Ed., Editeurs : Adda Y., Dupouy J.M., Philibert J., Quéré Y, Collection enseignement, INSTN-CEA (1991)
- Ermak D.L. et Buckholtz H., *J.Comp. Phys.*, **35**, 169 (1980)
- Escaig B. , *Phys. Stat. Sol.*, **28**, 463 (1968)
- Escaig B., *J. de Physique*, **36**, 255
- Escaig B., Thèse de Doctorat, Faculté des Sciences d'Orsay No A 383 (1968)
- Essmann U. et Mughrabi H., *Phil. Mag. A*, **40**, 731 (1979)
- Estrin Y. et Kubin L.P., *Mat Sci. and Eng.*, **A137**, 125 (1991)
- Fang X.F., Hagedorn J. et Dahl W., p. 639 dans "Strength of Metals and Alloys" (ICSMA 9), Brandon D.J., Chaim R. et Rosen A. (Eds), Vol. II, Freund Publishing Company, London (1989)
- Ferguson W.G., Kumar A., Dorn J.E., *J. Appl. Phys.*, **38**, 1863 (1967)
- Foreman A.J.E. et Makin J.E., *Can. J. Phys.*, **45**, 511 (1967)
- Foreman A.J.E. et Makin J.E., *Phil. Mag.*, **14**, 911 (1966)
- Foreman A.J.E., *Phil. Mag.* **15**, 1011 (1967)
- Fourie J.T., *Phil. Mag.*, **17**, 735 (1968)
- Franciosi P. et Zaoui A., *Acta Metall.*, **30**, 2141 (1982)
- Franek A., Kalus R. et Kratochvil J., *Phil. Mag. A*, **64**, 497 (1991)
- Friedel J., "Dislocations", Pergamon Press, London (1964).
- Friedel J., *Phil. Mag.*, **46**, 1169 (1955)
- Garstone J., Honeycombe R.W.K. et Greetham G., *Acta. Met.*, **4**, 485 (1956)
- Ghoniem N.M. et Amodeo R.J., p. 303 dans "Patterns, Defects et Materials Instabilities", édité par : D. Walgraef, N.M. Ghoniem, NATO ASI series, Dordrecht (Netherlands) : Kluwer Academic Publishers (1990)
- Ghoniem N.M. et Amodeo R.J., *Sol. State Phenomena*, Vol **3&4**, 377 (1988)
- Gil Sevillano J. et Aernoudt E., *Mat. Sci. Eng.* **86**, 35 (1987)
- Gil Sevillano J., 13<sup>e</sup> General Conference, Condensed Matter Division, European Physical Society (1993)
- Gil Sevillano J., Bouchaud E. et Kubin L.P., *Scripta Met.*, **25**, 355 (1991)
- Goriatchev S., communication privée, à paraître (1993)
- Grest G.S., Anderson M.P. et Srolovitz D.J., *Phys. Rev. B*, **38**, 4752 (1988)
- Groma I. et Pawley G.S., *Phil. Mag. A* **67**, 1459 (1993)
- Gulluoglu A. et Hartley C., *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, **1**, 1 (1992)
- Gulluoglu A., Srolovitz D.J., LeSar R., Lohmdahl P.S., dans "Simulation and Theory of Evolving Microstructures", édité par : M.P. Anderson et A.D. Rollett, Warrendale, PA: The Minerals, Metall. et Mat. Soc., à paraître
- Gulluoglu A.N., Srolovitz D.J., LeSar R., Lohmdahl P.S., *Scripta Met.*, **23**, 1347 (1989)
- Hansen J.P. et McDonald I.R., "Theory of simple liquids", p. 97, 2<sup>e</sup> ed., Academic Press (1986).

- Hansen N. et Kuhlmann-Wilsdorf D., *Mat. Sci. Eng.*, **81**, 141 (1986)
- Hart E.W., *Acta Met.*, **18**, 599 (1970)
- Hasegawa T., Yakou T. et Kocks U.F., *Mat. Sci. Eng.* **81**, 189 (1986)
- Hesselbarth H.W. et Steck E., *Solid State Phenomena*, Vol. **23 & 24**, 445 (1992)
- Hirsch P.B., "The Physics of Materials", Vol. 2, Cambridge University Press, p. 189 (1975)
- Hirth J.P. et Lothe J., "Theory of Dislocations", Wiley Interscience (1982)
- Hirth J.P., *J. of Appl. Phys.*, **32**, 700 (1961)
- Holt D. L., *J. Appl. Phys.*, **41**, 3197 (1970)
- Hoover W.G., Ladd A.J.C. et Moran B., *Phys. Rev. Lett.*, **48**, 1818 (1982)
- Huang J., Thèse de doctorat de l'université de Paris VI (1989)
- Indenbom V. L. and Orlov S. S., *Soviet Phys. JETP Lett.*, **6**, 274 (1967)
- Jiménes Ibanez F.J., Thèse de l'Université de Navarre, San Sebastien, Espagne
- Jossand T., Lothe J. et Skylstand K., *Acta. Metall.*, **13**, 271 (1965)
- Kahn J.W., *Acta Met.*, **9**, 795 (1961)
- Kirchner H. O. K., dans "Dislocation 1984", P. Veyssiére, J. Castaing and L.P. Kubin (Eds.). Editions du CNRS (Paris) p. 53 (1984)
- Kocks U. F., dans "Dislocations and Properties of Real Materials", p 125, London: The institute of Physics (1985)
- Kocks U. F., *Phil. Mag.*, **13**, 541 (1966)
- Kocks U.F. *J. of Eng. Materials and Technology*, *Trans ASME* 98, 76 (1976)
- Kocks U.F., Argon A.S., Ashby M.F., "Thermodynamics and kinetics of slip", *Progress in Materials Science*, Vol. **19**, Eds. B. Chalmers, J.W. Christian, T.B. Massalski, Pergamon Press, Oxford (1975)
- Kratochvil J. dans "Dislocations 93, Microstructures and Physical Properties", Eds. J. Rabier et al, *Trans Tech Publications (CH-Aedermannsdorf)*, sous presse (1993)
- Kratochvil J. et Saxlova M., *Scripta Met.*, **26**, 113 (1992)
- Kratochvil J., *Revue Phys. Appl.*, **23**, 419 (1988)
- Kroupa F., *Phil. Mag.*, **7**, 783 (1962)
- Kubin L.P. et Estrin Y., *Revue Phys. Appl*, **23**, 573 (1988)
- Kubin L.P. et Lépinoux J., dans "Strength of Metals and Alloys" p. 35 (ICSMA 8) Vol. 1, Kettunen P.O., Lepisto T.K., Lehtonen M.E. (Eds). Oxford : Pergamon Press (1988)
- Kubin L.P., Canova G., Condat M., Devincere B., Pontikis V., Bréchet Y., *Solid State Phenomena* Vol. **23&24**, 455 (1992)
- Kubin L.P., dans "Materials Science and Technology" vol. **6**, p. 137, R.W. Cahn, P. Haasen, E.J. Kramer (Eds). VCH (Weinheim, FRG), (1992)
- Kuhlmann-Wilsdorf D., *Trans. Metall. Soc., AIME* 224, 1947 (1962)
- Legrand B., Thèse de doctorat de l'université de Paris VI (1984)
- Lépinoux J. et Kubin L.P., *Scripta Met.*, **21**, 833 (1987)

- Lépinoux J., *Solid State Phenomena*, **3&4** p 389, CH-Aedermannsdorf: Trans Tech Publications (1988)
- Lépinoux J., Thèse doctorale de l'Université de Poitiers (1987)
- Li J. C. M., *Phil. Mag.*, **10**, 1097 (1964)
- Li J.C., *Acta. Metall.*, **8**, 296 (1960)
- Liu G. C. T. et Li J. C. M., *Phys. Stat. Sol.*, **18**, 517 (1966)
- Loginov B.M. et Degtyarev V.T., *Phys. Stat. Sol.(a)*, **120**, 397 (1990)
- Loginov B.M. et Predvoditelev A.A, *Sov. Phys. Solid State*, **23**, 63 (1981)
- Loginov B.M., *Phys. Stat. Sol.(a)*, **125**, 481 (1991)
- Louchet F. et Bréchet Y., p. 335 dans "Solid State Phenomena" Vol. **3&4**, Aedermannsdorf, CH : Trans Tech Publications (1988)
- Lubarda V., Blume J. et Needleman A., *Acta. Metall. Mater.*, **41**, 625 (1993)
- Magnin T., Driver J., Lépinoux J., Kubin L.P., *Rev. Phys. Appliquée*, **19**, 467 et 483 (1984)
- Mason W.P., dans "dislocation Dynamics", Ed. Rosenfield A.R., Hahn G.T., Bement A.L., Jaffee R.I., Hill McGraw, p. 487 (1968)
- Mott N.F., *Phil. Mag.*, **43**, 1151 (1952)
- Mughrabi H., p. 407, dans "3<sup>d</sup> Int. Conf. on the Strength of Metals et Alloys"; Vol. **1**, Cambridge : The Institute of Metals (1973)
- Mughrabi H., Ackermann F., Herz K., dans "Fatigue Mechanisms", Ed. J.T. Fong, ASTM-STP 675, p. 69 (1979)
- Mughrabi H., p. 199, dans "Constitutive Equations in plasticity", A. S. Argon (Ed.), MIT Press, (1975)
- Mughrabi H., *Revue Phys. Appl.*, **23**, 367 (1988)
- Mughrabi H., *S. Afr. J. Phys.*, **9**, 62 (1986)
- Nabarro F.R.N., "Theory of crystal dislocations", Clarendon Press, Oxford (1967)
- Nabarro, dans "Strength of Metals and Alloys" (ICSMA 7), H.J. McQueen et al. (Eds.), Pergamon Press, Oxford, Vol. **3**, p. 1678, (1986)
- Neuhaus R. et Schwink Ch., *Phil. Mag. A*, **65**, 1463 (1992)
- Neumann P., *Materials Science and Engineering*, **81**, 465 (1986)
- Neumann P.D., *Acta. Metall.*, **19**, 1233 (1971)
- Nicolis G. et Prigogine I., "Self Organisation in Non-Equilibrium Systems", New-York: Wiley J., (1977)
- Philibert J., dans "Dislocations et Deformation plastique", p. 101, Groh P., Kubin L.P. et Martin J-L. (Eds.), Les éditions de Physique (1979)
- Raj S.V. et Pharr G.M., *Mat. Sci. Eng.* **81**, 217 (1986)
- Rollett A.D. and Kocks U.F. dans "Dislocations 93, Microstructures and Physical Properties, Eds. J. Rabier et al, Trans Tech Publications (CH-Aedermannsdorf), sous presse (1993)
- Saada G. et Bouchaud E., *Acta Met.*, **41**, 2173 (1993)

- Saada G., *Acta Metall.*, **8**, 841 (1960)
- Saada G., *Material Science and Eng.*, **A137**, 177 (1991)
- Schiller C. et Walgraef D., *Acta. Metall.*, **36**, 563 (1988)
- Schoeck G., Frydman R., *Phys. Stat. Sol. (b)* **53**, 661 (1972)
- Schwink Ch., *Phys. Stat. Sol.* **18**, 557 (1966)
- Seeger A. dans "Strength of Metals and alloys", p. 463 (ICSMA 8) Vol. **1**, Kettunen P.O., Lepisto T.K., Lehtonen M.E. (Eds). Oxford : Pergamon Press (1988)
- Seeger A. et Frank W., dans "Solid State Phenomena", p 125, Vol **3&4**, Aedermannsdorf, Ch : Trans Tech Publications (1988)
- Seeger A., *Phil. Mag.*, **46**, 1194 (1955)
- Sharpe N. G., *Phil. Mag.*, **7**, 859 (1962)
- Staker M.R. et Holt D.L., *Acta Metall.*, **20**, 569 (1972)
- Steck B. et Hesselbarth H.W., dans "Plasticity 91", Grenoble (France), *Int. J. of Plasticity* (1991)
- Taylor G. I., *Proc. Roy. Soc.*, **A145**, 362 (1934)
- Tyupkina O.G., *Phil. Mag. A*, **65**, 111 (1992)
- Vanderschaeve G. et Escaig B., dans "Dislocations et Deformation Plastique : Yravals 1979", Eds. Groh P., L.P. Kubin et J.L. Martin, Les éditions de Physique (1979)
- Veyssiere P., *Rev. Phys. Appl.*, **23**, 431 (1988)
- Volterra V., *Ann. Ecole Norm. Sup. (3)*, **24**, 400 (1907)
- Walgraef D. et Aifantis E.C., *J. Appl. Phys.*, **58**, 688, (1985)
- Weertman et Wertman, dans "Dislocation in Solids", Vol **3**, FRN Nabarro éditeur (1980).
- Willis J. R., *Phil.Mag.*, **21**, 931 (1970)
- Yoffe E. H., *Phil. Mag.*, **5**, 161 (1960)