

THESE

Présentée par

Sanae NAAMANE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR de l'UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE

Spécialité

Physique et Chimie des Matériaux

**ETUDE DE LA DEFORMATION PLASTIQUE DE LA
FERRITE A BASSE TEMPERATURE : SIMULATIONS DE
DYNAMIQUE DES DISLOCATIONS**

Soutenance prévue le 22 juillet 2008,

devant le jury composé de :

Daniel CAILLARD	Directeur de Recherche	CNRS - CEMES	Rapporteur
Edgar RAUCH	Directeur de Recherche	CNRS - LMS	Rapporteur
Laurent DUPUY	Ingénieur de Recherche	CEA - SRMA	Examineur
Ladislav KUBIN	Directeur de Recherche	CNRS - LEM	Examineur
Richard PORTIER	Professeur	CNRS - INSP	Examineur
Benoit DEVINCRE	Directeur de Recherche	CNRS - LEM	Directeur de thèse
Ghiath MONNET	Ingénieur de Recherche	EDF R&D - MMC	Codirecteur de thèse

Table de matières

Introduction générale	4
------------------------------------	----------

Chapitre I

Etude bibliographique du comportement mécanique de l'acier de cuve et du monocrystal de fer à basse température.....	8
---	----------

1- Régimes du comportement mécanique de l'acier de cuve.....	10
1.1- Comportement mécanique de l'acier de cuve dans le régime thermique	10
1.2- Enjeux	12
2- Etude microstructurale de l'acier de cuve.....	13
2.1- La ferrite.....	13
2.2- Les carbures	13
3- Comportement mécanique du fer monocristallin à basse température.....	15
3.1- Géométrie du glissement.....	16
3.2- Caractérisation de la déformation	18

Chapitre II

Détermination des lois de mobilité des dislocations à l'échelle mésoscopique.....	34
--	-----------

1- Mouvement des dislocations à basse température	36
1.1- Structure de cœur de la dislocation vis	36
1.2- Mouvement et mécanisme du double-décrochements	38
1.3- Mouvement des dislocations coin	39
1.4- Le stade 0 : conséquence de l'anisotropie de mobilité des dislocations	40
2- Les facteurs de l'activation thermique.....	41
2.1- Entropie d'activation.....	41
2.2- Dépendance en température	42
2.3- Effet de la contrainte	42
3- Détermination des grandeurs caractéristiques	43
3.1- Détermination de la contrainte effective en fonction de la température	43

3.2- Détermination de l'énergie d'activation en fonction de la contrainte effective.....	44
3.3- Comparaison avec les autres estimations dans la littérature.....	46
4- Comparaison avec la théorie.....	47
4.1- Tension de ligne couplée à un potentiel de Peierls.....	47
4.2- Approche en force.....	48
5- Mobilité des dislocations à l'échelle mésoscopique.....	50
5.1- Dislocations vis.....	50
5.2- Dislocations non-vis.....	52

Chapitre III

Simulation de la dynamique des dislocations..... 56

1- A propos des simulations de dynamique des dislocations.....	58
2- A propos du code microMégas.....	60
2.1- Discrétisation des lignes de dislocations.....	61
2.2- Calcul des forces effectives sur les segments.....	62
2.3- Prise en compte des lois de mobilité du fer dans mM.....	63
2.4- Les règles locales.....	65
2.5- Les conditions aux limites.....	66
2.6- Configuration initiale des dislocations.....	68
3- Validation des lois de mobilité des dislocations.....	69
3.1- Conditions de simulation.....	69
3.2- Dépendance en température.....	70
3.3- Dépendance en vitesse de déformation.....	73

Chapitre IV

Durcissement induit par les carbures dans l'acier de cuve..... 80

1- Revue bibliographique.....	82
1.1- Carbures dans l'acier de cuve.....	82
1.2- Durcissement induit par les précipités.....	83
1.3- Problématique du durcissement à basse température.....	86
2- Interaction avec une rangée périodique de particules.....	87

2.1- Conditions et résultats de simulations.....	87
2.2- Influence des différentes mobilités des dislocations.....	91
2.3- Prédiction du durcissement d’Orowan.....	97
3- Durcissement dans l’acier de cuve	104
3.1- Conditions des simulations	104
3.2- Résultats des simulations	105
3.3- Cas de la dislocation vis infinie dans une distribution aléatoire de particules.....	107
3.4- Espacement effectif entre particules	110
3.5- Extension du modèle de durcissement.....	111
4- Nouveau Modèle de durcissement par précipitation à basse température.....	112
Chapitre V	
Durcissement associé aux interactions entre dislocations.....	117
1- Durcissement de la forêt dans les cristaux de structure cubique centrée.....	119
1.1- Classement des interactions entre dislocations dans la structure cubique centrée..	120
1.2- Propriétés quasi-statiques des jonctions et durcissement athermique.....	122
1.3- Modèles du durcissement de la forêt dans le régime thermique.....	124
2- Simulations du durcissement dans le régime thermique.....	133
2.1- Conditions de simulations.....	134
2.2- Résultats de simulations.....	134
3- Prédiction du durcissement.....	141
3.1- Analyse géométrique	141
3.2- Modèle de prédiction du durcissement	143
4- Comparaison des résultats de simulations avec les autres modèles	148
Conclusion générale.....	155
Perspectives	158
Annexe A : Acier de cuve	160
Annexe B : Base de vecteurs de discrétisation pour la structure cubique centrée	165
Annexe C : Procédure de traitement des jonctions	167
Annexe D : Expressions des asymptotes	169

Introduction générale

1- Contexte

Les propriétés mécaniques des composants des réacteurs nucléaires REP ont fait l'objet de plusieurs études et investigations. Celles-ci ont pour objectif essentiel le développement de modèles prédictifs du comportement des éléments critiques de la structure en fonction du temps d'exploitation des centrales.

Face aux difficultés inhérentes aux manipulations des matériaux radioactifs et avec l'augmentation croissante des puissances de calcul, de nombreux projets (Projet EDF REVE, projet européen SIRENA, etc.) ont été lancés pour étudier par simulations numériques l'évolution microstructurale et mécanique des différents matériaux impliqués.

La modélisation du comportement mécanique des aciers de cuve, 16MND5 (aciers bainitiques faiblement alliés) constitue une part importante du projet européen PERFECT (Prediction of Irradiation Damage Effects in Reactor Components). De l'échelle atomique à l'échelle de la structure, des simulations multi-échelles ont ainsi été entreprises pour déterminer les facteurs physiques contrôlant le vieillissement sous irradiation d'un tel acier. Dans ce cadre, la technique de la « Dynamique des Dislocations » (DD) est identifiée comme la seule méthode permettant de simuler l'évolution des propriétés plastiques du matériau en fonction des transformations microstructurales prédites aux échelles fines. En effet, c'est pour le moment le seul type de simulations pouvant prendre en compte le comportement collectif d'une large densité de dislocations à l'intérieur d'une microstructure réaliste.

Comme dans tous les matériaux de structure cubique-centrée, le comportement individuel des dislocations dans les aciers de cuve dépend fortement de la température et de la vitesse de déformation. Vers les basses vitesses de déformation/les hautes températures, l'interaction des dislocations avec la microstructure est athermique et pratiquement entièrement contrôlée par la « tension de ligne » des dislocations. La mobilité des dislocations est alors isotrope, c'est-à-dire indépendante du caractère des dislocations. En revanche, pour les grandes vitesses de déformation/les basses températures, les mécanismes physiques mis en jeu changent radicalement. La mobilité des dislocations est activée thermiquement et donc influencée par le caractère des dislocations, la vitesse de déformation, sans exclure pour autant de possibles effets de la tension de ligne.

Compte tenu des différences fondamentales du comportement des dislocations entre ces deux régimes, deux thèses de doctorat ont été lancées dans le cadre du projet PERFECT ; l'une était dédiée au comportement athermique (Thèse de S. Queyreau, soutenue le 8 février 2008) et

l'autre, la présente thèse, porte sur le comportement plastique à basse température (dans le régime thermique).

2- Objectifs de la thèse

Les simulations DD sont basées sur la théorie élastique des dislocations, encadrées par des règles inhérentes à la structure atomique du cœur des dislocations, souvent appelées « règles locales ». Si la théorie élastique des dislocations a un caractère universel et ne varie pas d'une simulation à l'autre, il n'en va pas de même des règles locales. Celles-ci sont alors les vraies représentantes du matériau et doivent être définies scrupuleusement pour chaque simulation DD.

Idéalement, lors d'une étude de modélisation multi-échelles, aucune variable d'ajustement ne devrait être utilisée dans la chaîne de simulations. Ainsi, toutes les données nécessaires à l'établissement des règles locales de la DD doivent être issues directement de l'expérience ou alternativement nous parvenir depuis des simulations aux échelles plus fines telles que la Dynamique Moléculaire (DM).

Or, au démarrage de ce travail, aucune information précise sur la nature des interactions entre dislocations vis et défauts d'irradiation n'était disponible à basse température. C'est pourquoi, faute de données suffisantes, nous avons mis de côté la problématique importante du durcissement d'irradiation pour nous concentrer plus spécifiquement sur les questions du durcissement par précipitation et par l'ancrage de la forêt. Comme nous allons le voir dans ce mémoire, l'activation thermique et l'anisotropie de mobilité des dislocations modifient en profondeur la plasticité cristalline dont aujourd'hui l'étude fondamentale est trop souvent focalisée sur les propriétés des matériaux de structure cubique à faces centrées. Avant ce travail, une seule tentative de modélisation à basse température par DD d'un matériau de structure cubique centrée (Mo) avait été réalisée. Tous les résultats obtenus sont donc originaux et viennent répondre à des questions fondamentales souvent laissées en suspend depuis de nombreuses années.

3- Contenu du travail

Concernant les aciers de cuve, deux sources du durcissement méritent d'être considérées en priorité : l'interaction des dislocations avec les carbures intra-lattes et l'interaction avec la microstructure initiale des dislocations. Or, à basse température, les sections vis des dislocations se distinguent des autres parties par une mobilité extrêmement réduite et activée thermiquement. Cette propriété spécifique implique d'une part l'existence d'une contrainte effective forte sur toutes les dislocations mobiles (vis et non-vis), contrainte purement thermique et indépendante du module de cisaillement ; d'autre part, la formation de boucles de dislocations de forme excessivement allongée dans la direction du vecteur de Burgers, en contradiction avec la forme elliptique d'équilibre quasi-statique imposée par la tension de

ligne à haute température. Comme nous allons le voir dans ce mémoire, les conséquences de ces propriétés dynamiques des dislocations sont nombreuses et impliquent de revoir de nombreuses propriétés élémentaires des dislocations, tel que le processus de contournement des précipités ou la stabilité des jonctions. En effet, nous ne pouvons plus parler d'une « force » moyenne d'obstacles sans préciser le caractère de la dislocation réagissant avec un obstacle.

Par ailleurs, en plus des contraintes internes, la contrainte effective pour un segment vis dépend de la vitesse imposée, de la température et de la longueur moyenne du segment. Comme la température n'affecte pas de la même façon la mobilité des segments vis et non-vis, les mécanismes de durcissement vont être dépendants de deux nouveaux paramètres physiques : la sensibilité à la température et la sensibilité à la vitesse, toutes deux étant dépendantes de la microstructure.

En conséquence, le durcissement par des carbures à basse température ne doit plus correspondre à l'image habituelle du mécanisme d'Orowan puisque celui-ci n'est plus seulement contrôlé par la seule tension de ligne. Ce durcissement va être affecté par l'écart de mobilité entre les différents segments, écart qui dépend de la température. L'écrouissage, dû à l'interaction entre dislocations, va lui aussi être influencé par la différence de mobilité entre les segments. De même, la présence dans la forêt de dislocations répulsives peut modifier la mobilité des dislocations si elles viennent modifier la longueur effective des segments vis.

Dans ce travail, nous allons donc essayer de répondre à ces questions à l'aide des simulations DD, qui vont nous permettre de valider des modèles de prédiction du durcissement existants ou d'extraire les informations pertinentes au développement de nouveaux modèles.

4- Organisation du mémoire

Nous commençons le mémoire par une étude bibliographique du comportement mécanique des aciers de cuve et des monocristaux de fer, ce qui nous permet d'encadrer et cibler nos futures simulations DD, et, surtout, d'établir les lois de mobilité des dislocations, présentées dans le deuxième chapitre.

Dans le troisième chapitre, nous décrivons brièvement la technique de simulations DD utilisée dans ce travail. Une attention particulière est prêtée aux problématiques liées à l'utilisation des lois de mobilité activées thermiquement et au conflit entre la dépendance en longueur d'une part et la discrétisation des lignes de dislocations d'autre part. Dans ce chapitre, la validation de nos choix est présentée en comparaison avec l'expérience.

Le quatrième chapitre est dédié au problème du durcissement par précipitation, où nous discutons d'abord le mécanisme d'Orowan dans le cas des dislocations infinies réagissant avec une rangée régulière de particules, ce qui permet de quantifier la différence du durcissement observé entre les dislocations de différents caractères. Ensuite, nous montrons et analysons les résultats des simulations d'une microstructure représentative des carbures intra-

lattes. Un modèle permettant de prédire le durcissement par précipitation à basse température est proposé à la fin de ce chapitre.

Le durcissement de la forêt est abordé dans le dernier chapitre à l'aide de simulations modèles. Un seul type de jonctions, la plus forte de type mixte symétrique, sera ici exploré. Le rôle drastique de la température est mis en évidence par les résultats des simulations DD. Le modèle proposé dans le cadre du durcissement par précipitation est une fois encore éprouvé avec les résultats de simulations de la forêt. Finalement, les résultats de nos simulations sont discutés en comparaison avec les différents modèles présentés dans la littérature.

Chapitre I

Etude bibliographique du comportement mécanique de l'acier de cuve et du monocristal de fer à basse température

Table de matières

Introduction	10
1- Régimes du comportement mécanique de l’acier de cuve.....	10
1.1- Comportement mécanique de l’acier de cuve dans le régime thermique	10
1.2- Enjeux	12
2- Etude microstructurale de l’acier de cuve.....	13
2.1- La ferrite.....	13
2.2- Les carbures	13
3- Comportement mécanique du fer monocristallin à basse température.....	15
3.1- Géométrie du glissement.....	16
3.2- Caractérisation de la déformation	18
Conclusions	29
Références bibliographiques	31

Introduction

Dans ce premier chapitre, on va commencer tout d'abord par donner un aperçu sur les caractéristiques du comportement mécanique de l'acier de cuve en évoquant principalement sa dépendance en température et en vitesse de déformation. Ceci va nous permettre de situer le contexte de cette étude. Les principaux constituants de la microstructure de cet acier seront présentés, par la suite, dans le but de mettre au clair les informations nécessaires dont on va tenir compte dans nos futures simulations.

Dans la dernière partie, on donnera une revue bibliographique sur le comportement mécanique à basse température du fer. On s'intéressera tout particulièrement aux paramètres influençant la déformation plastique, à savoir : les systèmes de glissement observés, la dépendance en température, la dépendance en vitesse de déformation, la dépendance en orientation et la dépendance en impuretés.

1- Régimes du comportement mécanique de l'acier de cuve

De nombreuses études expérimentales sur le comportement mécanique de l'acier de cuve (16MND5) ont été entreprises ces dernières années [Renevey 1998 – Tanguy 2001 – Haušild 2002 – Mathieu 2006 – Libert 2007]. A travers ces études, deux régimes du comportement mécanique ont été mis en évidence : le régime athermique et le régime thermique. Cette distinction est due à la dépendance en température et en vitesse de déformation soulignée dans le régime thermique. La transition entre ces deux régimes est définie par une température, appelée température athermique, qui dépend de la vitesse de déformation considérée. Pour une vitesse de déformation de l'ordre de 10^{-4} s^{-1} , la température athermique est située aux alentours de la température ambiante [Mathieu 2006 – Libert 2007].

1.1- Comportement mécanique de l'acier de cuve dans le régime thermique

Dans le régime thermique, le comportement mécanique de l'acier de cuve a fait l'objet de plusieurs travaux [Tanguy 2001 – Mathieu 2006 – Libert 2007]. Les effets de la température et de la vitesse de déformation ont été étudiés. La figure (1) montre des courbes de traction effectuées par Libert [Libert 2007] à une vitesse de déformation de 5.10^{-4} s^{-1} en considérant un intervalle de température allant de -196 à 25°C . Dans ce travail, la température athermique correspond à la température ambiante. De cette figure, on peut constater que la limite élastique augmente considérablement quand la température diminue.

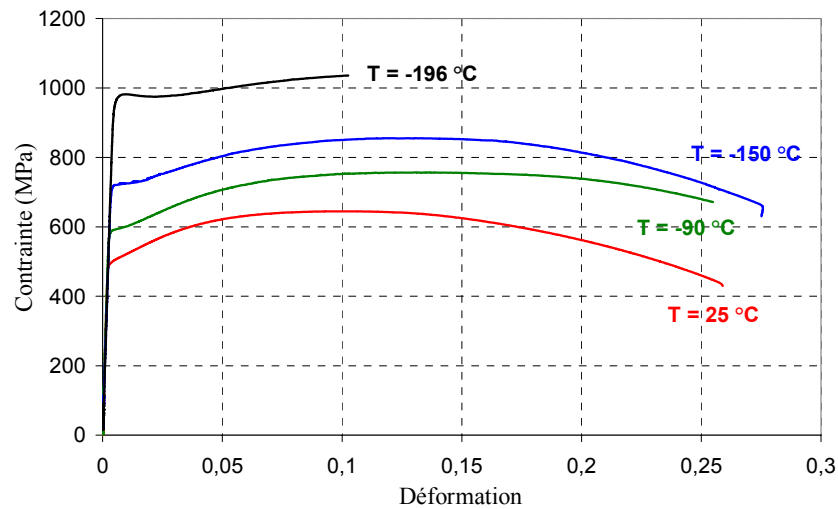


Figure 1 - Courbes de traction de l'acier de cuve déformé à des températures inférieures à la température ambiante ($\dot{\epsilon} = 5.10^{-4} \text{ s}^{-1}$) [Libert 2007].

Parallèlement à l'étude de l'effet de la température sur la limite élastique, l'effet de la vitesse de déformation a été étudié. Les résultats montrent que, d'un côté, pour une température fixe, la limite élastique augmente quand la vitesse de déformation augmente. D'un autre côté, la température athermique augmente quand la vitesse de déformation augmente. Ces deux points sont illustrés sur la figure (2) [Tanguy 2005].

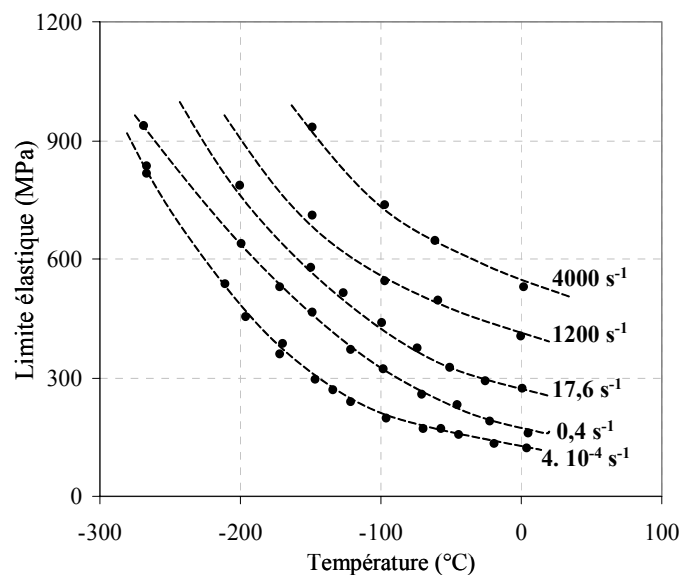


Figure 2 - Variation de la limite élastique de l'acier de cuve avec la température et avec la vitesse de déformation [Tanguy 2005].

1.2- Enjeux

Dans le régime de fonctionnement normal, la cuve est soumise à une température de 320°C. Un accident de type perte de réfrigérant primaire entrainerait l'injection de l'eau à température ambiante dans la cuve, ce qui conduirait à un refroidissement brutal de celle-ci. Combinée à l'effet des irradiations qui affecte la transition ductile-fragile, une telle situation pourrait imposer des températures où le matériau de la cuve peut être fragile et où son comportement mécanique peut être situé dans le régime thermique.

La rupture fragile des aciers de cuve a fait l'objet de plusieurs travaux ces dernières années [Renevey 1998 – Mathieu 2006 – Libert 2007]. Différentes approches ont été utilisées pour prendre en compte les mécanismes de rupture. Ces approches sont fondées sur des méthodes de modélisation macroscopique permettant de prendre en compte différentes échelles. Les mécanismes de la plasticité sont décrits à l'aide de modèles micromécaniques. L'effet de la température, par exemple, est encore mal compris aussi bien dans son interprétation que dans sa description dans la modélisation. Dans la plupart des modélisations, on traduit cet effet uniquement par un changement de paramètres dans la loi de comportement [Margolin 1999 – Tanguy 2005 – Yang 2003].

Une modélisation de la rupture passe par une modélisation d'une multitude d'événements locaux : amorçage, ouverture et propagation de fissures, plasticité locale, hétérogénéité de la microstructure, etc. La description de tous ces événements doit tenir compte des phénomènes physiques contrôlant la déformation plastique et leur impact sur le comportement macroscopique. Dans ce cadre, une étude de la plasticité à l'échelle mésoscopique, qui est l'échelle des dislocations, se justifie pleinement. Par ailleurs, dans certains cas, la vitesse de déformation peut atteindre une valeur élevée. C'est le cas par exemple de la zone plastique située au fond des fissures. Une description fine de cette zone nécessite une prise en compte des deux régimes de comportement plastique. En effet, si la vitesse de déformation augmente, cela génère une augmentation de la température de transition entre les deux régimes et le comportement plastique initialement situé dans le régime athermique se retrouve dans le régime thermique.

Dans le but de donner des éléments de réponse concernant les mécanismes de déformation plastique de l'acier de cuve, deux études ont été entreprises en parallèle pour cerner les deux régimes du comportement mécanique. L'étude du régime athermique a fait l'objet de la thèse de Queyreau [Queyreau 2008]. Dans ce travail, on s'intéressera uniquement au régime thermique.

2- Etude microstructurale de l’acier de cuve

La microstructure de l’acier de cuve a fait l’objet de plusieurs observations et interprétations dans la littérature [Miloudi 1997 – Sestier 1998 - Carassou 2000 – Haušild 2002 – Novaha 2003 – Pesci 2004 – Mathieu 2006 – Diawara 2007]. Les détails de la composition chimique de cet acier, les traitements thermiques subis ainsi que les interprétations de sa microstructure sont décrits dans l’annexe A. On retient, cependant, que l’acier de cuve a une microstructure bainitique. Dans les paragraphes qui suivent, on parlera uniquement des deux principaux constituants de cette microstructure, dont on tiendra compte dans cette étude, qui sont la ferrite et les carbures.

2.1- La ferrite

La phase ferritique de l’acier de cuve se présente sous forme de paquets de lattes. La forme de ces paquets de lattes semble être équiaxe alors que celle des lattes est allongée [Haušild 2002]. L’épaisseur des paquets varie entre 10 et 20 μm . L’épaisseur des lattes est évaluée entre 0,8 et 1,5 μm et leur longueur varie entre 10 et 13 μm [Diawara 2007].

A l’échelle des simulations de dynamique des dislocations (DD), on est obligé de faire un certain nombre de simplifications pour étudier les mécanismes de déformation plastique de la ferrite à basse température. La présence de paquets de lattes et de lattes dans la phase ferritique constitue une source d’hétérogénéité de déformation influant le début du régime de déformation plastique. Plusieurs facteurs contribuent à cet « effet polycristal » : les joints entre lattes ou entre paquets de lattes, la taille des paquets, la désorientation entre les lattes, etc. Afin de nous affranchir à ce problème, on va limiter notre étude à l’échelle d’une latte de ferrite qui sera considérée comme un monocristal. Dans ce contexte, la troisième partie de ce chapitre sera entièrement consacré à une étude bibliographique du comportement mécanique de la ferrite monocristalline dans le régime thermique.

2.2- Les carbures

Les carbures sont le deuxième principal constituant de la microstructure de l’acier de cuve. La nature de ces carbures est essentiellement la cémentite [Carassou 2000], mais l’apparition de carbures de composition différente n’est pas exclue. D’une manière générale la composition des carbures est Fe_xC , x variant entre 2,3 et 3 [Mathieu 2006]. Il faut noter aussi qu’à travers une microanalyse aux rayons X, il a été montré que la cémentite, en plus du fer qui est son principal constituant, contient du manganèse, du chrome et du molybdène [Martin 1999].

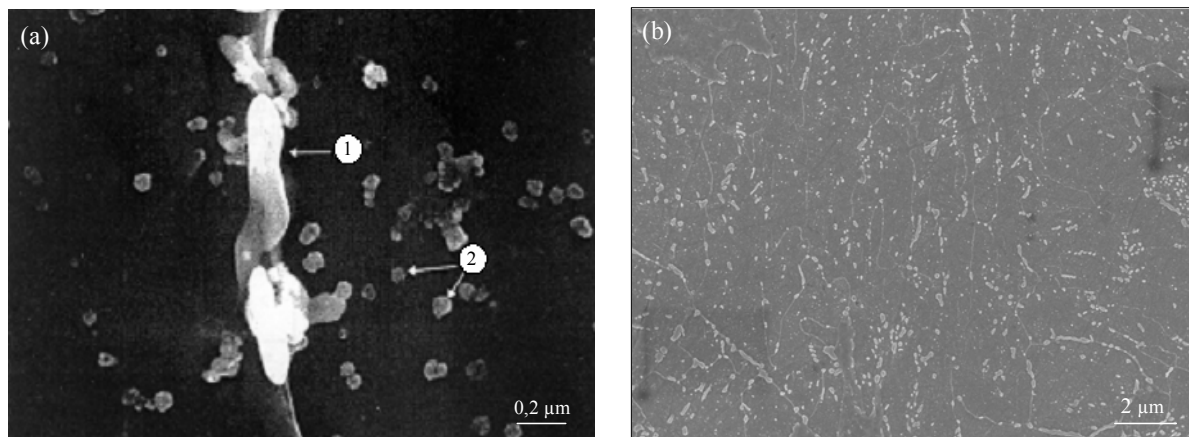


Figure 3 – Les carbures dans l'acier de cuve, observés au MEB, (a) [Carassou 2000], (b) [Monnet 2006].

La répartition de carbures dans l'acier de cuve est très hétérogène. Néanmoins, on peut distinguer deux types :

- Les carbures repartis aux anciens joints austénitiques constituant leurs sites privilégiés de germination et de croissance. Ce sont les carbures notés (1) dans la figure (3-a). Ils sont observables au microscope électronique à balayage (MEB). Leur forme est allongée, leur épaisseur est de l'ordre de 0,2 μm et leur longueur peut atteindre entre 1 et 2 μm. La présence de ces carbures a facilité, dans de nombreux travaux, la distinction des anciens joints austénitiques. Il faut noter qu'on peut aussi trouver ce type de carbures entre les paquets de lattes de ferrite.
- Les carbures précipités au sein des paquets de ferrite (carbures notés (2) dans la figure (3-a)). Leur forme est sphéroïdale ou d'aiguilles. On les trouve soit en amas de taille environ 3 à 4 μm, soit individuels de taille moyenne environ 0,1 μm [Mathieu 2006 – Diawara 2007]. Karlik et *al.*, Obertlik et *al.*, et Monnet [Karlik 2003 – Obertlik 2005 – Monnet 2006] ont constaté une présence importante de ces carbures individuelles à l'intérieur des lattes de ferrite (figure (3-b)).

En ce qui concerne la densité de ces carbures, peu d'informations sont disponibles dans la littérature. Le travail de Ortner et ses collaborateurs [Ortner 2003] portant sur la détermination de la densité volumique des carbures dans l'acier de cuve à travers des observations au microscope électronique à transmission (MET) est peu satisfaisant. En effet, ces auteurs se sont intéressés principalement aux amas de carbures se trouvant dans les paquets de lattes en supposant que la fraction de carbures individuels est négligeable. La densité volumique trouvée dans ce travail est $7,6 \pm 2,7 \cdot 10^{17} \text{ m}^{-3}$. Cependant, un travail récent [Queyreau 2008] s'est intéressé à l'estimation de la densité des carbures individuelles se trouvant à l'intérieur des lattes de ferrite à travers trois clichés élaborés au MEB [Monnet 2006]. Les densités volumiques pour les trois micrographies sont estimées à $1,9 \cdot 10^{19}$, $2,6 \cdot 10^{19}$ et $4,5 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$. Dans l'optique d'une détermination du durcissement induit par les carbures, l'auteur a jugé

par la suite, une densité moyenne de 3.10^{19} m^{-3} comme représentative de la densité des carbures dans les lattes de ferrite.

Pour nos simulations, on ne va considérer que les carbures répartis dans les lattes de ferrite et on se basera sur la densité volumique moyenne calculée par Queyreau [Queyreau 2008] pour déterminer le durcissement induit par ces carbures (chapitre IV).

3- Comportement mécanique du fer monocristallin à basse température

En plus du fer α , la famille des métaux de structure Cubique Centrée (CC) contient un ensemble d'éléments (V, Nb, Ta, Cr, Mo, W, ...) qui présentent un comportement mécanique semblable [Kubin 1976, 1982]. Ces métaux constituent un exemple dans lequel de nombreuses propriétés mécaniques s'expliquent en terme de friction de réseau. La déformation plastique est gouvernée par le déplacement thermiquement activé des dislocations vis. La structure du cœur particulière de ces dislocations induit une friction du réseau s'opposant au mouvement. De fortes contraintes sont nécessaires pour rendre glissiles les cœurs de ces dislocations à basse température. On observe alors des propriétés mécaniques spécifiques et très différentes de celles relatives aux métaux de structure Cubique à Faces Centrées (CFC). Ces différences se manifestent à tous les niveaux d'observations macroscopiques: courbes de déformation, géométrie du glissement, structure des dislocations, etc. Rappelons tout de même que si les aspects microscopiques de la déformation plastique des matériaux CFC sont relativement bien connus, il n'en est pas de même pour les matériaux CC.

Toutes les études qu'on trouve dans la littérature sur le comportement plastique du fer monocristallin ont été effectuées entre 1960 et 1980 [Stein 1963, 1966 – Taoka 1964 – Keh 1967, 1968 – Takeuchi 1967, 1968, 1972 – Spitzig 1970a, 1970b, 1970c, 1973, 1981 – Quesnel 1975 – Kitajima 1979 – Kuramoto 1979]. La grande difficulté de réaliser des monocristaux et le caractère magnétique du fer constituent les causes essentielles du nombre réduit d'investigations. Face à ces difficultés, des calculs atomiques ont vu le jour pendant la même période pour analyser le comportement plastique [Escaig 1966 – Kroupa 1967 – Vitek 1969, 1974 – Christian 1970]. Ces travaux ont permis de comprendre certaines particularités de ce matériau. De 1980 à nos jours, les calculs atomiques ont fait des progrès considérables [Rodney 1999 – Frederiksen 2003 – Osetsky 2003 – Bacon 2004 – Cai 2004 – Domain 2005 – Chaussidon 2006 – Tapassa 2007]. A notre échelle, les résultats de ces calculs nous permettent de comprendre, par exemple, l'origine de la friction du réseau, le mécanisme de déplacement des dislocations, etc. Dans les paragraphes qui suivent, on donnera un aperçu de toutes les informations obtenues à travers les données expérimentales du comportement mécanique de la ferrite dont on dispose.

3.1- Géométrie du glissement

La géométrie du glissement du fer à basse température est complexe et reste encore mal comprise. En effet, les traces du glissement observées sont souvent sinueuses et ramifiées [Taoka 1964 – Takeuchi 1967]. Les systèmes de glissement actifs dépendent fortement de la température [Keh 1967, 1968 – Spitzig 1970c], de l’orientation des échantillons par rapport à l’axe du chargement [Takeuchi 1967 – Spitzig 1970c] et du taux d’impuretés [Stein 1966 – Spitzig 1973 – Quesnel 1975]. Ces facteurs rendent difficile la détermination exacte des systèmes de glissement actifs. Ce problème ne se limite pas au cas du fer mais est commun à tous les matériaux de structure CC.

En général, la direction de glissement est identifiée comme étant la famille $\langle 111 \rangle$. Pour former un système de glissement, cette direction est naturellement associée, dans la structure CC, à un plan de glissement dense de type $\{110\}$, $\{112\}$ ou $\{123\}$. Si la direction de glissement est bien identifiée par les observations, ce n’est pas le cas pour le plan de glissement. On trouve dans la littérature plusieurs résultats à ce sujet.

Tout d’abord, le glissement est évoqué d’autant plus « cristallographique » que la température est basse. En effet, à température ambiante, plusieurs travaux [Duesbery 1991 – Honeycombe 1968 – Šestak 1967] mettent en évidence un glissement « non cristallographique » le long d’un plan arbitraire dans la zone contenant la direction $\langle 111 \rangle$. Ce glissement « non cristallographique » n’a pas été observé à basse température [Kubin 1976] et toutes les discussions sur les traces de glissement tournent autour des plans $\{110\}$, $\{112\}$ et $\{123\}$.

Bien que les traces du glissement soient souvent sinueuses, de nombreux travaux [Low 1961 – Šestak 1967 – Takeuchi 1967] sur le fer ainsi que sur d’autres matériaux de structure CC ont permis d’écarter l’activation du système $\langle 111 \rangle \{123\}$ dont l’observation expérimentale est interprétée comme un glissement colinéaire sur une paire de plans voisins $\{110\}$ - $\{112\}$. La figure (4) met en évidence l’observation des systèmes de glissement pour le fer monocristallin contenant 3% de silicium déformé à différentes températures allant de la température ambiante à 128 K [Taoka 1964]. On peut noter qu’uniquement les systèmes de glissement $\langle 111 \rangle \{110\}$ sont observés.

Par ailleurs, à travers le tableau (1) rassemblant les systèmes de glissement observés à basse température pour une sélection de matériaux de structure CC, on peut constater que le plan $\{110\}$ est cité dans toutes les observations tandis que le plan $\{112\}$ est cité en deuxième lieu uniquement pour quelques matériaux de cette sélection. Šestak [Šestak 1979] explique cette différence de géométrie du glissement entre les métaux et alliages de structure CC par une forte différence de la structure du cœur des dislocations vis de ces matériaux.

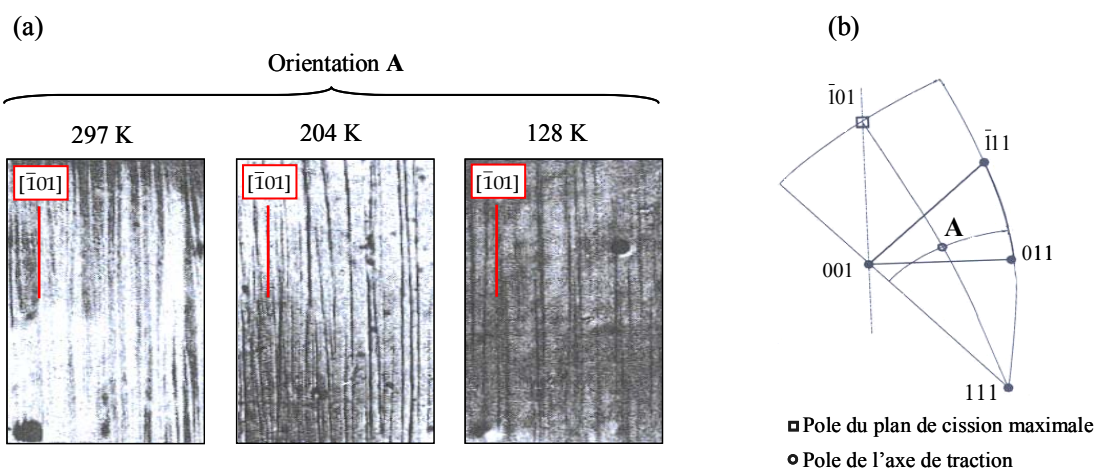


Figure 4 - Observations du glissement lors d'un chargement sur monocristaux de fer contenant 3% de silicium. (a) Lignes du glissement observées à quatre différentes températures, (b) Repérage de l'orientation du chargement dans le repère des monocristaux [Taoka 1964].

Matériaux CC	Plans de glissement observés	Références
Ta	{110}	[Ferriss 1962 – Mitchell 1965]
	{110} et {112}	[Takeuchi 1972]
Nb	{110}	[Mitchell 1963 – Louchet 1975]
	{110} et {112}	[Taylor 1965 – Reid 1966 – Bowen 1967]
Mo	{110} et {112}	[Irwin 1974 – Šestak 1979]
W	{110}	[Schadler 1960 – Garlick 1964]
	{110} et {112}	[Šestak 1979]
Fe	{110}	[Cox 1956 – Šestak 1979]
	{110} et {112}	[Spitzig 1970c]
Fe-Ti	{110} et {112}	[Spitzig 1973]
	{110} et {112}	[Spitzig 1980]
Fe-Si	{110}	[Hull 1963 – Taoka 1964 – Šestak 1979]

Tableau 1 - Résumé des systèmes du glissement actifs observés à basse température pour quelques matériaux CC.

Enfin, il paraît important de donner un aperçu des discussions présentes dans la littérature sur le glissement dévié. Ce mécanisme est considéré comme facile dans les matériaux de structure CC, notamment dans le fer, du fait, d'un côté de la structure du cœur compact des dislocations vis (*cf.* chapitre II) et de l'autre côté de la multiplicité des plans de déviations possibles. A basse température, aucune information n'est disponible dans la littérature concernant les conditions de son activation. Dans le régime athermique, cependant, il a été noté qu'il est visible dès le début de la déformation [Franciosi 1983 – Taoka 1964]. Bien que dans certains travaux [Foxall 1967], les auteurs l'écartent complètement, les lignes de

glissement sinueuses sont interprétées, dans d’autres travaux, comme une conséquence de ce mécanisme [Irwin 1974 – Spitzig 1970b – Takeuchi 1969 – Wasserbäch 1986]. Queyreau [Queyreau 2008] a récemment étudié le rôle du glissement dévié sur les mécanismes de la forêt et d’Orowan à l’aide des simulations de dynamique des dislocations pour le cas du fer déformé dans le régime athermique. Le critère de déviation adopté dans cette étude est purement mécanique, c’est-à-dire qu’une dislocation vis change de plan de glissement si la contrainte effective dans un plan de déviation est supérieure à celle dans le plan de glissement initial. Queyreau montre ainsi que l’influence du glissement dévié dépend de la déformation :

- à petite déformation, le glissement dévié induit un durcissement significatif, résultat qui a aussi été obtenu dans le cas des matériaux de structure CFC [Kubin 1999 – Madec 2002]. En effet, la déviation produit de courts segments colinéaires (débris) qui sont trop petits pour être activés dans le plan de déviation et ancrent ainsi les dislocations primaires. Le facteur de Schmid sur les systèmes déviés et la force des interactions avec les obstacles ont été identifiés comme deux paramètres influant la densité de débris colinéaires et donc de l’écrouissage associé à la déviation ;
- à plus forte déformation, on retrouve l’effet plus souvent discuté d’adoucissement [Kubin 1999]. La déviation constitue alors une solution pour contourner des obstacles et réduire par annihilation la densité des dislocations stockée. Il a été mis en évidence qu’à ce stade de la déformation, l’activité du glissement dévié est beaucoup plus intense et une déformation plastique associée aux systèmes de glissement déviés peut être notable.

Dans notre étude de la plasticité dans le régime thermique, l’hypothèse d’un glissement dévié ne sera pas considérée dans nos simulations par manque d’informations. Cette simplification constitue potentiellement un point faible de notre étude.

3.2- Caractérisation de la déformation

L’écoulement plastique à basse température des monocristaux du fer ou des matériaux CC en général dépend d’un certain nombre de paramètres : la température, la vitesse de déformation, l’orientation des monocristaux par rapport à l’axe du chargement et la présence d’impuretés. Avant de décrire en détail l’influence de chacun de ces paramètres, il est important de noter la différence observée entre les courbes de déformation dans le régime thermique et dans le régime athermique. La figure (5) montre deux courbes de traction obtenues pour deux monocristaux de fer ayant la même orientation (au centre du triangle standard) et se déformant à des vitesses comparables mais à deux températures différentes, 295 et 141 K. Comme on peut le constater, la forme de la courbe dépend fortement de la température considérée.

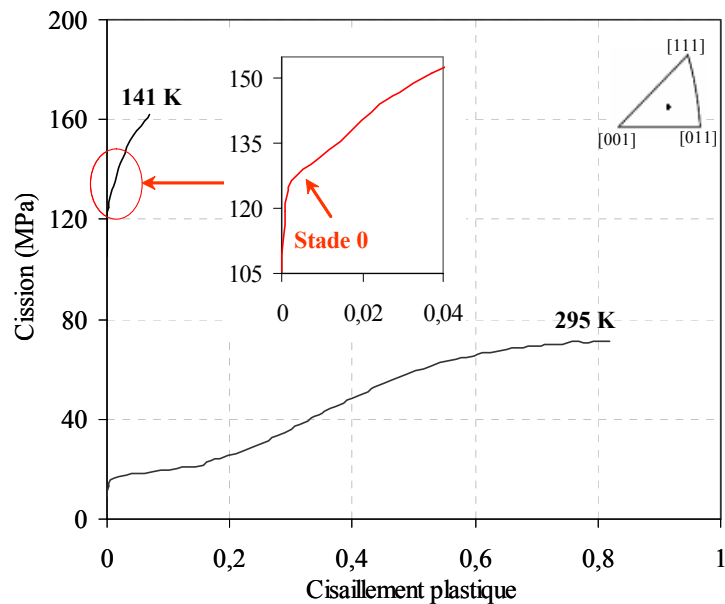


Figure 5 - Courbes de traction de monocristaux de fer, déformés à deux températures, 295 K ($\dot{\epsilon} = 5,6 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$) [Spitzig 1970c] et 141 K ($\dot{\epsilon} = 4 \cdot 10^{-5} \text{ s}^{-1}$) [Quesnel 1975].

A basse température, cette forme particulière de la courbe de déformation est évoquée pour de nombreux matériaux de structure CC: le fer [Jaoul 1960 – Keh 1968], le molybdène [Richter 1970], le tantale [Mitchell 1965] et le niobium [Mitchell 1963 – Wasserbäch 1986]. Par ailleurs, on note sur cette courbe la présence, au début de la déformation, d’un stade à fort durcissement appelé dans la littérature « stade 0 » [Brown 1962 – Mitchell 1963]. Le lecteur peut se référer au chapitre II pour plus de détails sur ce stade. Il faut noter, néanmoins, que l’étendue et la forme de ce stade varient fortement avec la température, la vitesse de déformation, les impuretés et la structure initiale des dislocations.

La présence du « stade 0 » dans les courbes de déformation à basse température rendent la détermination de la contrainte critique (en anglais, Critical Resolved Shear Stress – CRSS) assez délicate. Dans un premier temps, pour discuter l’influence de tous les paramètres cités auparavant sur cette contrainte critique, on considère le critère conventionnel à 0,2% de la déformation plastique pris dans la littérature. On verra ensuite, dans le chapitre II, à travers une analyse plus approfondie de la courbe de déformation à basse température, que cette limite ($R_{0,2\%}$) ne constitue pas une bonne définition pour identifier la contrainte critique.

3.2.1- Dépendance en température

Les résultats expérimentaux de tous les travaux menés sur la déformation à basse température du fer montrent que la contrainte critique varie fortement avec la température. Cette variation est due essentiellement à la présence des mécanismes thermiquement activés. Les dislocations

vis contrôlant l’écoulement plastique se déplacent par le mécanisme de double-décrochements qui est un mécanisme activé thermiquement. On reviendra sur les détails de ce mécanisme dans le deuxième chapitre. La figure (6) met en évidence cette dépendance de la contrainte critique, $R_{0,2\%}$, en température pour des monocristaux de fer contenant un taux de carbone variant entre 0 et 20 ppm, ayant la même orientation et déformés à une vitesse de l’ordre de 10^{-4} s^{-1} [Keh 1968 – Kuramoto 1979 – Quesnel 1975 – Spitzig 1970a – Stein 1966].

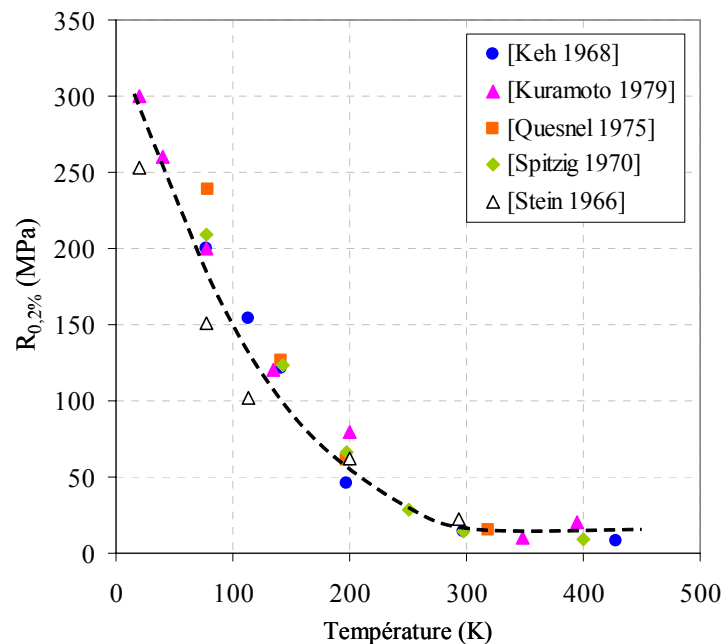


Figure 6 - Variation de la contrainte critique, $R_{0,2\%}$ avec la température pour des monocristaux de fer déformés à une vitesse de l’ordre de 10^{-4} s^{-1} .

Sur cette figure, on peut distinguer clairement les deux régimes du comportement plastique: le régime thermique et le régime athermique. La température de transition entre ces deux régimes (la température athermique) dépend essentiellement de la vitesse de déformation. Dans la littérature, en se référant aux valeurs de $R_{0,2\%}$ et pour une vitesse de déformation de l’ordre de 10^{-4} s^{-1} , la température athermique est évoquée égale à 300 K pour le fer et ses alliages (figure (6)) [Stein 1966 – Keh 1968 – Spitzig 1970a, 1973, 1981]. Pour les autres matériaux CC, elle varie entre 230 K pour le niobium [Foxal 1967 – Kubin 1973] et 400 K pour le molybdène [Lawley 1964 – Vesely 1968].

3.2.2- Dépendance en vitesse de déformation

L’effet de la vitesse de déformation sur la variation de la contrainte critique est très peu évoqué dans la littérature. La figure (7-a) montre l’effet du changement de la vitesse de déformation sur la contrainte critique en fonction de la température dans le cas d’un monocristal de fer dont l’orientation est située au centre du triangle standard [Takeuchi 1968].

Cet effet se présente sous deux aspects. D’une part, pour une température fixe, une augmentation de la vitesse de déformation engendre une augmentation de la contrainte critique. D’autre part, l’augmentation de la vitesse de déformation affecte la température athermique. Cette dernière augmente quand la vitesse de déformation augmente.

La sensibilité à la vitesse de déformation peut être quantifiée à l’aide de l’expression suivante :

$$S = -\frac{\Delta\tau}{\ln(\dot{\epsilon}_2 / \dot{\epsilon}_1)} \quad (1)$$

où $\dot{\epsilon}_1$ et $\dot{\epsilon}_2$ sont les vitesses de déformation imposées et $\Delta\tau$ la variation de la contrainte critique résultante de la variation de la vitesse de déformation.

La figure (7-b) met en évidence la sensibilité à la vitesse de déformation en fonction de la température pour un changement de vitesse de déformation constant (de $5,6 \cdot 10^{-4}$ à $2,8 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$) [Keh 1967]. Comme on peut le constater, la sensibilité maximale se situe au niveau des températures intermédiaires. Ce résultat a également été évoqué aussi dans d’autres travaux [Keh 1968 – Spitzig 1970a].

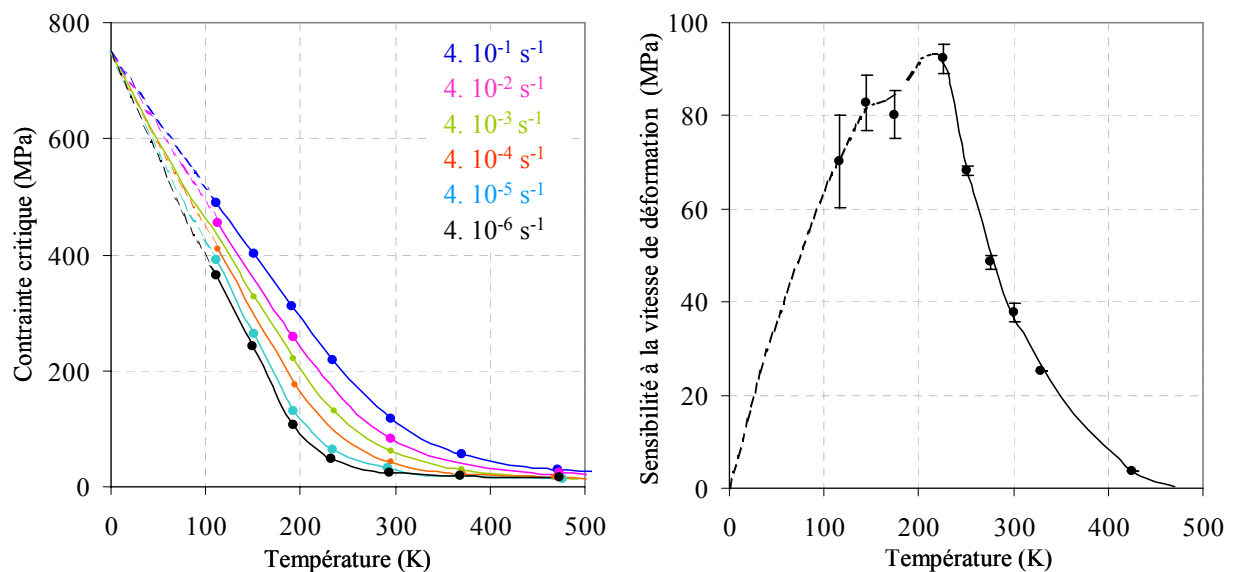


Figure 7 - (a) Variation de la limite proportionnelle avec la température pour trois vitesses de déformation différentes. (b) Sensibilité à la vitesse de déformation en fonction de la température (augmentation de la vitesse de $5,6 \cdot 10^{-4}$ à $2,8 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$) [Keh 1968].

Enfin, il semble intéressant de noter aussi que la dépendance de la contrainte critique en vitesse de déformation a permis de discuter, dans la littérature, l’un des paramètres physiques les plus importants de l’activation thermique qui est le volume d’activation. Un essai expérimental couramment utilisé pour déterminer ce paramètre consiste à faire varier

brutalement la vitesse de déformation et mesurer la variation de la contrainte critique qui en découle. L’expression qui permet d’obtenir le volume d’activation est la suivante:

$$V = -kT \frac{\ln(\dot{\epsilon}_2 / \dot{\epsilon}_1)}{\Delta\tau}, \quad (2)$$

où V est le volume d’activation, k la constante de Boltzmann, T la température, $\dot{\epsilon}_1$ et $\dot{\epsilon}_2$ les vitesses de déformation imposées durant, respectivement, la première et la deuxième partie de l’essai et $\Delta\tau$ la variation de la contrainte critique qui résulte de la variation de la vitesse de déformation.

La figure (8) montre la variation du volume d’activation avec la contrainte critique pour des monocristaux de fer dont l’orientation est située au centre du triangle standard et dont le saut de vitesse de déformation correspond à une augmentation de $5,6 \cdot 10^{-4}$ à $2,8 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ [Keh 1968 – Spitzig 1970a – Spitzig 1973 – Quesnel 1975 – Kuramoto 1979]. Cette figure met en évidence le fait que le volume d’activation augmente quand la contrainte critique augmente.

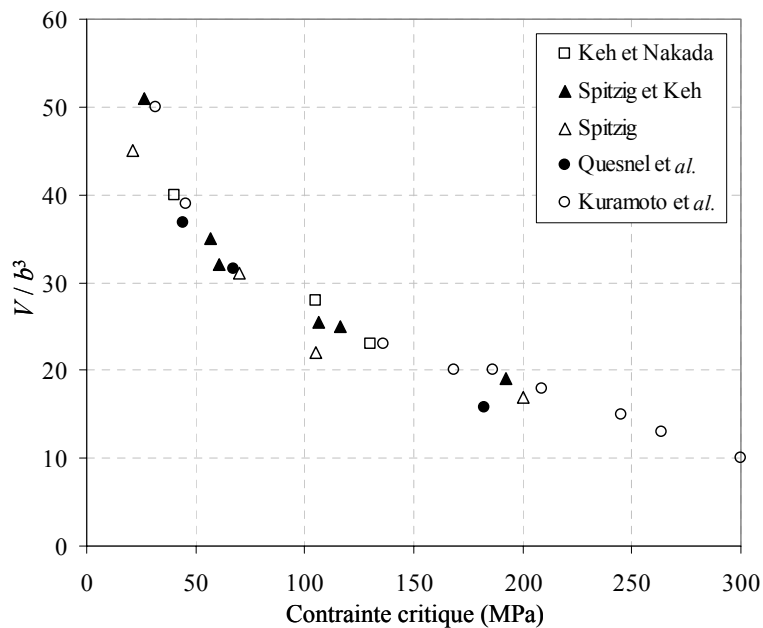


Figure 8 - Variation du volume d’activation avec la contrainte critique (saut de la vitesse de déformation de $5,6 \cdot 10^{-4}$ à $2,8 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$) [Keh 1968 – Spitzig 1970a – Spitzig 1973 – Quesnel 1975 – Kuramoto 1979].

La mesure du volume d’activation est importante dans le cas des matériaux où le comportement plastique est activé thermiquement. En effet, le volume d’activation est relié à l’aire balayée durant l’événement de l’activation thermique. Cette quantité nous informe donc sur les dimensions caractéristiques de la configuration de la ligne de la dislocation (les doubles-décrochements) contrôlant la mobilité.

3.2.3- Dépendance en orientation

La dépendance en orientation du comportement du fer ou des matériaux CC en général a fait l'objet de plusieurs travaux, à la fois dans le régime thermique et dans le régime athermique. Cette dépendance apparaît dans un premier temps dans la forme de la courbe de déformation et dans le niveau de la contrainte critique. La figure (9) met en évidence ces deux effets pour des monocristaux de fer ayant trois orientations distinctes et déformés à différentes températures. La forme de la courbe est différente suivant le type du système de glissement activé. La contrainte critique pour les orientations situées au centre du triangle standard et à côté de la direction [001] est faible par rapport à celle pour les orientations situées à côté de la frontière [011]-[111]. Ces effets ont été évoqués aussi pour le régime athermique dans plusieurs travaux [Kumagai 1990 – Spitzig 1970b – Takeuchi 1967 – Taoka 1964].

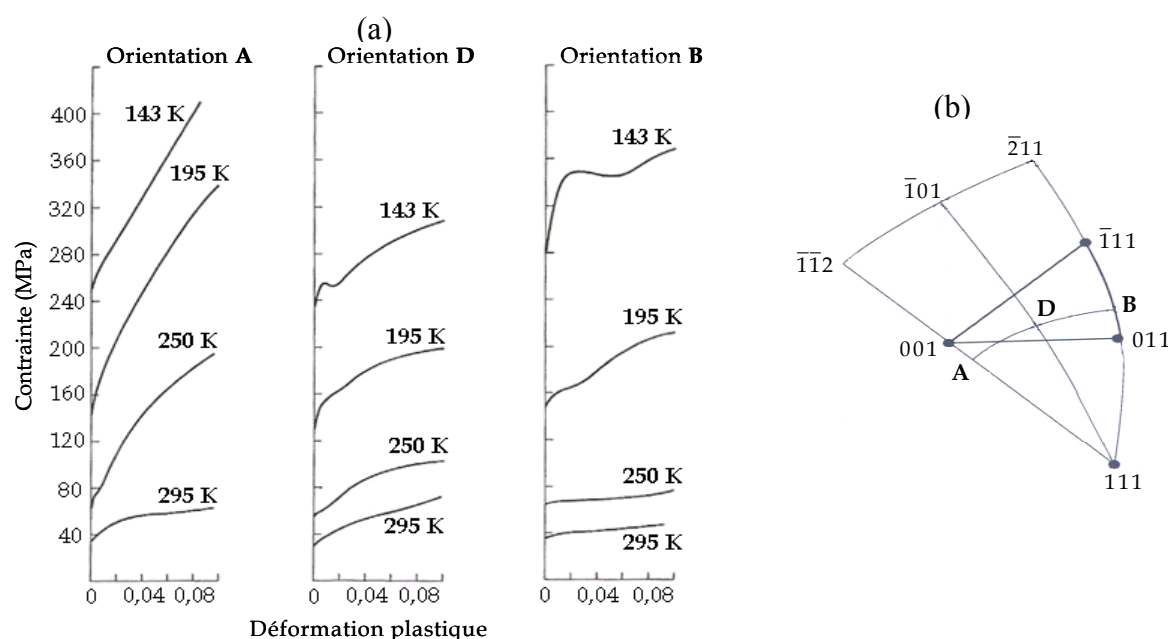


Figure 9 - (a) Portion initiale de la courbe de déformation pour trois orientations de monocristaux de fer déformés à différentes températures ($\dot{\epsilon} = 5,6.10^{-4} \text{ s}^{-1}$), (b) repérage des trois orientations dans le triangle standard [Spitzig 1970b].

La relation entre orientation et systèmes de glissement activés demeure assez complexe et confuse malgré le nombre de résultats disponibles dans la littérature [Taoka 1964 – Keh 1967 – Takeuchi 1967 – Spitzig 1970b, 1970c – Kitajima 1982]. En effet, pour certaines orientations, les traces de glissement observées sont ondulées et ramifiées. La détermination exacte, dans ce cas, des systèmes de glissement actifs relève de l'impossible. L'interprétation des traces de glissement observées a toujours été sujet à discussion. Dans la plupart des travaux, la démarche adoptée consiste à corréliser la direction moyenne des bandes de glissement observées à la trace du système de glissement la plus proche et à considérer ce

système comme étant activé [Taoka 1964 – Takeuchi 1967 – Spitzig 1970b]. Cette manière de procéder constitue la cause principale des dispersions des résultats de la littérature.

L'effet de l'orientation est souvent discuté dans la littérature à travers la courbe $\psi(\chi)$ où χ est l'angle entre le plan de la cisssion résolue maximale et le plan de référence, $(\bar{1}01)$ (figure (10)), et ψ est l'angle entre le plan de glissement observé après déformation et le plan de référence. La figure (11) présente la relation entre ces deux angles dans le cas du fer contenant 3% de silicium pour plusieurs monocristaux ayant des orientations différentes et se déformant à 77 K. Deux cas de chargement sont considérés : traction et compression. Ce résultat constitue un exemple de ce qu'on trouve dans la littérature et ne peut pas être considéré comme une généralité.

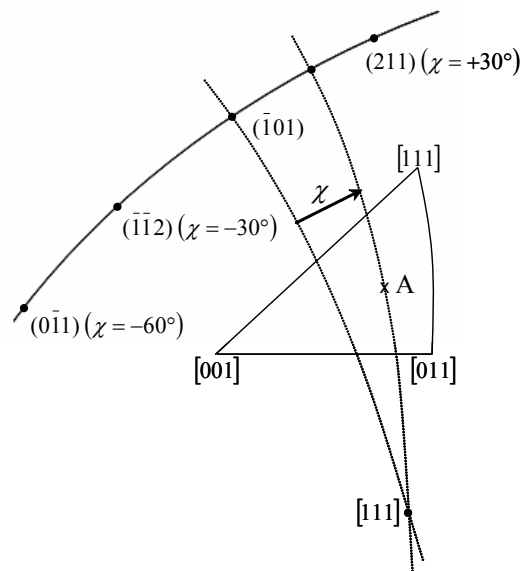


Figure 10 - Repérage de l'angle χ pour une orientation A.

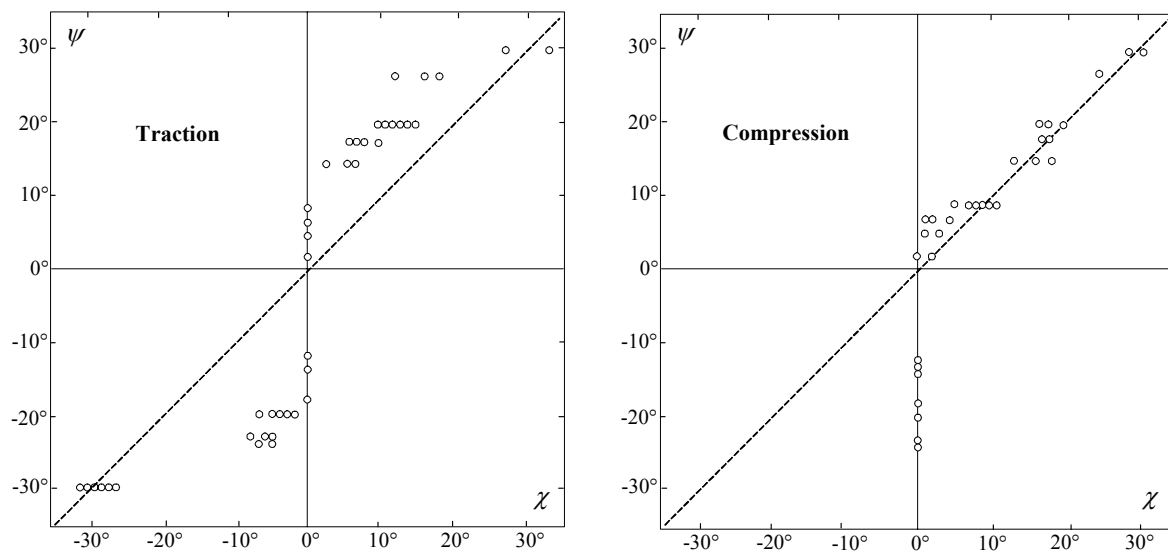


Figure 11 - Variation de $\psi(\chi)$ pour deux cas de chargement : traction et compression (monocristaux de fer contenant 3% de silicium, déformés à 77 K et à $\dot{\epsilon} = 2.10^{-6} \text{ s}^{-1}$) [Šestak 1967].

A travers cette figure, les auteurs présentent l'influence de l'orientation sur les systèmes de glissement sous deux aspects. D'un côté, $\psi(\chi)$ est asymétrique par rapport à l'origine ($\chi=0$), à la fois pour la traction et pour la compression. De l'autre côté, $\psi(\chi)$ en traction est différente de $-\psi(-\chi)$ en compression. Malgré l'incertitude sur l'interprétation des traces de glissement, ces deux constatations sont évoquées dans plusieurs travaux sur le fer et ses alliages [Taoka 1964 – Takeuchi 1967 – Spitzig 1970b – Kitajima 1982], ainsi que sur d'autres matériaux CC [Bowen 1967 – Takeuchi 1972]. Elles sont expliquées comme étant dues essentiellement au fait que les plans de glissement $\{112\}$ à $\psi=+30^\circ$ et $\psi=-30^\circ$ ne sont pas équivalents. Un sens de glissement facile appelé « sens du maclage » et un autre, difficile, appelé « sens d'anti-maclage » sont évoqués dans la littérature [Irwin 1974 – Spitzig 1970b – Spitzig 1981]. Cette asymétrie du glissement pour le système $\langle 111 \rangle \{112\}$ engendre un non respect de la loi de Schmid. En effet, cette loi prévoit un glissement sur un système donné lorsque la cission critique sur ce système atteint une valeur limite. Le fait que la cission critique dépend du sens de la contrainte appliquée, cela génère deux valeurs limites et ceci constitue une violation de cette loi. Ce non respect de la loi de Schmid est listé dans la littérature comme l'une des caractéristiques principales de la déformation des matériaux CC dans les deux régimes thermique et athermique. Pour mettre en évidence ce point, la figure (12) [Spitzig 1970b] montre la variation du rapport $\tau / \tau_{(\bar{1}01)}$ entre la contrainte critique sur le plan de glissement observé et la contrainte critique sur le plan de référence en fonction de l'angle χ . Cette figure ne montre que le cas d'un chargement en traction. La courbe en pointillés présente la loi de Schmid. Le non respect de la loi de Schmid est considéré, dans ce travail, comme d'autant plus prononcé que la température est basse. La courbe à 143 K montre l'asymétrie entre la contrainte critique à $\psi=+30^\circ$ et celle à $\psi=-30^\circ$. Ce résultat a été noté aussi par Takeuchi et

Mano [Takeuchi 1972] pour le tantale et Taoka *et al.* [Taoka 1964] pour le fer contenant 3% de silicium.

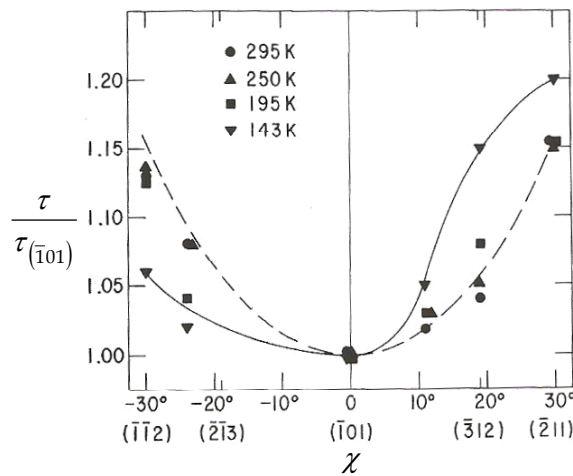


Figure 12 - Dépendance de la contrainte critique en orientation et en température pour un monocristal de fer ($\dot{\epsilon} = 5,6 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$) [Spitzig 1970b]

Ces résultats sur la dépendance en orientation sont à prendre avec précaution dans la mesure où la détermination des systèmes de glissement actifs n’est pas certaine. Dans nos futurs simulations, On a choisi de ne prendre en compte que la famille des systèmes de glissement $\langle 111 \rangle \{110\}$. Les résultats sur la déformation des monocristaux de fer ayant des orientations au centre du triangle standard ($\chi=0$) ne présentent aucune ambiguïté quand à l’activation de la seule famille de glissement $\langle 111 \rangle \{110\}$ (*cf.* figure (5-a)). Les traces du glissement observées sont bien définies et ne présentent pas d’ondulations [Taoka 1964].

Enfin, il semble important de noter qu’à basse température (inférieure aux environs 70 K) et pour des orientations proches de la direction [001], le maclage a été évoqué, dans quelques travaux, comme un deuxième mécanisme de déformation [Cox 1957 – Spitzig 1973 – Stein 1966 – Taoka 1964]. D’ailleurs, pour s’affranchir du maclage et pour étudier uniquement l’effet de l’orientation sur les systèmes de glissement, les échantillons étudiés ont souvent subi une pré-déformation à la température ambiante [Bowen 1967 – Spitzig 1970c].

3.2.4- Dépendance en impuretés

L’effet des impuretés sur le comportement plastique du fer a fait l’objet de plusieurs travaux. Dans les premières études [Cottrell 1949 – Low 1944], une dépendance des propriétés mécaniques en impuretés des matériaux CC est observée. Certains auteurs ont même attribué la dépendance de la contrainte critique en température à la présence des impuretés. Cottrell et Bilby [Cottrell 1949] évoquent l’ancrage des dislocations mobiles par les atomes interstitiels comme cause du niveau élevé de la contrainte critique observé à basse température. Les fluctuations thermiques dues à l’augmentation de la température aident à la libération des

dislocations ancrées et par la suite à la diminution de la cission critique. Cette analyse a été supportée par la théorie de Fleischer [Fleischer 1962]. Cependant, à partir du moment où la dépendance de la contrainte critique en température a été expliquée en terme de la friction du réseau, l’effet des impuretés a été étudié sous un autre angle. Dans le cas du fer, Stein et Low [Stein 1963] et Stein [1966] ont étudié l’influence du carbone sur les propriétés mécaniques. Leurs résultats évoquent une augmentation de la limite $R_{0,2\%}$ quand le taux du carbone augmente (figure (13)). Ce durcissement est évoqué d’autant plus marqué que la température est basse et varie linéairement avec la racine carré du taux de carbone. Ce durcissement a été expliqué par une forte interaction entre les dislocations et les solutés. Il a été noté aussi pour le tantale avec des impuretés d’azote [Lechenmann 1970].

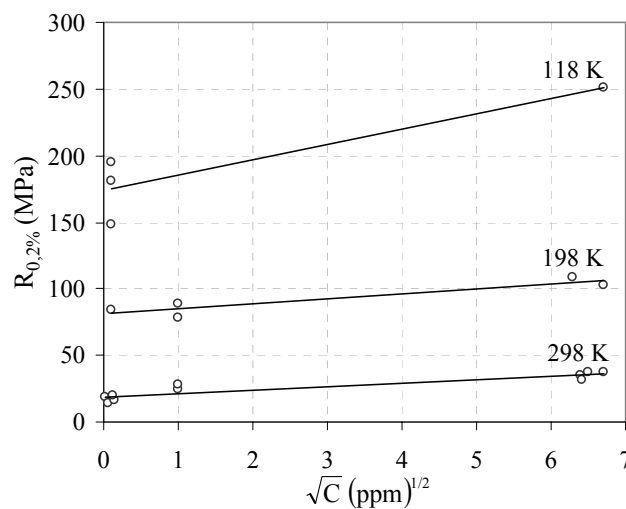


Figure 13 - Variation de la contrainte critique $R_{0,2\%}$ avec la racine carré du taux de carbone pour le fer déformé à trois températures différentes (orientation des monocristaux située au centre du triangle standard et $\dot{\epsilon} = 4,5.10^{-4} \text{ s}^{-1}$) [Stein 1966].

Cependant, dans d’autres travaux, une anomalie d’effet des impuretés a été évoquée. Suivant la température, la présence des impuretés peut soit générer un adoucissement soit un durcissement [Aono 1980 – Gibala 1973 – Kitajima 1982 – Kuramoto 1979 – Nakada 1968 – Quesnel 1975 – Sato 1973]. Ceci apparaît dans la figure (14) pour les deux systèmes fer-carbone et fer-azote. Comme on peut le remarquer, pour des températures moyennes, les impuretés ont un effet adoucissant tandis que pour les autres températures, leur effet est plutôt durcissant.

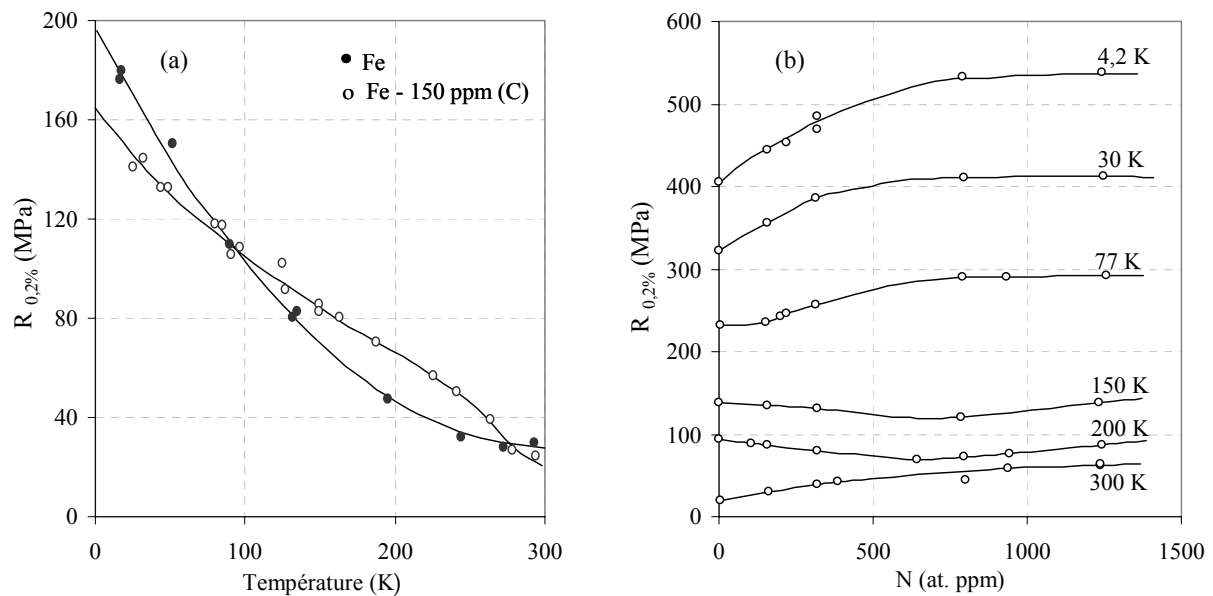


Figure 14 - Variation de la limite $R_{0,2\%}$ (a) avec la température pour le fer et le fer contenant 150 ppm de C [Kuramoto 1979], (b) avec le taux d'azote pour le fer déformé à différentes températures [Aono 1980] (l'orientation des monocristaux est située au centre du triangle standard et $\dot{\epsilon} = 5,6 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$).

Pour expliquer l'effet durcissant ou adoucissant des atomes interstitiels, Sato et Meshii [Sato 1973] et Suzuki [Suzuki 1979] se sont intéressés à l'interaction des dislocations avec ces atomes. A partir des modèles existants du mécanisme de déplacement des dislocations vis, le double-décrochements, ils ont élaboré de nouveaux modèles intégrant d'une manière simple l'interaction de ces dislocations avec les atomes interstitiels. Ces modèles ont révélé que l'énergie de formation du double-décrochements peut soit augmenter soit diminuer en présence des atomes interstitiels, tandis que l'interaction entre les décrochements et les interstitiels engendre toujours un durcissement. A partir de cette analyse, en fonction de la température considérée, le résultat de ces deux effets est soit un durcissement soit un adoucissement.

Conclusions

En guise de conclusion, on va essayer tout d’abord de résumer les informations principales dérivant de ce chapitre. Ensuite on présentera le lien entre ces informations et les données d’entrée de nos futures simulations.

Les informations qui découlent de cette étude bibliographique sont :

- le comportement mécanique à basse température de l’acier de cuve dépend fortement de la température et de la vitesse de déformation. La limite élastique augmente quand la température diminue ou quand la vitesse de déformation augmente ;
- la microstructure de l’acier de cuve est constituée principalement d’une matrice ferritique composée de lattes, et de carbures réparties en amas ou individuellement ;
- dans le cas du fer monocristallin, en fonction de la température et de la vitesse de déformation considérées, deux régimes du comportement mécanique sont mis en évidence, le régime thermique et le régime athermique ;
- dans le régime thermique, les caractéristiques de la déformation dépendent de plusieurs facteurs : la température, la vitesse de déformation, l’orientation et les impuretés.

Comment passer des données expérimentales aux données d’entrée des simulations DD ?

Ce travail s’inscrit dans le cadre de l’étude du comportement mécanique de l’acier de cuve à basse température. Le but est de fournir des éléments de réponse concernant la plasticité dans le régime thermique de la phase principale de cet acier, la ferrite. Comme on l’a expliqué, on s’intéressera, plus précisément, à l’échelle d’une latte de ferrite.

Pour les simulations de dynamique des dislocations, certaines données expérimentales peuvent être indispensables (*cf.* chapitre II). On est alors contraint de faire un certain nombre de simplifications en fonction des données expérimentales disponibles. Dans ce contexte, même si la ferrite de l’acier de cuve contient 100 ppm de carbone [Pareige 1994], toute l’étude sera consacrée au cas de la ferrite contenant un taux de carbone variant entre 0 et 20 ppm dans la mesure où toutes les données expérimentales exploitables correspondent à ces teneurs. Cette simplification se justifie pleinement du fait que le comportement mécanique de l’acier de cuve présente des caractéristiques similaires à celles du comportement du fer.

Au sujet des systèmes de glissement, uniquement les systèmes de type $\{110\}$ seront considérés dans nos simulations. Le choix des directions de sollicitation au centre du triangle standard nous permettra de satisfaire ce choix.

Enfin, pour répondre aux questions de la plasticité dans les lattes de ferrite, il est indispensable, dans ce travail, de rendre compte du durcissement lié aux carbures intra-lattes. Une densité de carbures de 3.10^{19} m^{-3} sera considérée dans les simulations.

Références bibliographiques

- [Aono 1980] – Y. Aono, K. Kitajima, E. Kuramoto, *Scripta Metall.*, 14, 321 (1980)
- [Bacon 2004] – D. J. Bacon, Y. N. Osetsky, *Mater. Sci. Eng., A*, 365, 46 (2004)
- [Bhadeshia 1990] – H. K. D. H. Bhadeshia, J. W. Christian, *Metall. Trans.*, A21, 767 (1990)
- [Bowen 1967] – D. K. Bowen, J. W. Christian, G. Taylor, *Can. J. Phys.*, 45, 903 (1967)
- [Brown 1962] – N. Brown, R. A. Ekvall, *Acta Metall.*, 10, 1101, (1962)
- [Cai 2004] – W. Cai, V. V. Bulatov, J. Chang, J. Li, S. Yip, dans « *Dislocations in Solids* », ed : F. R. N. Nabarro et J. P. Hirth, 12, 1 (2004)
- [Carassou 2000] – S. Carassou, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris (2000)
- [Chaussidon 2006] – J. Chaussidon, M. Fivel, D. Rodney, *Acta Mater.*, 54, 3407 (2006)
- [Christian 1970] – J. W. Christian, V. Vitek, *Rep. Prog. Phys.*, 33, 307 (1970)
- [Cottrell 1949] – A. H. Cottrell, B. Bilby, *Proc. Phys. Soc. Lond.*, A62, 49 (1949)
- [Cox 1956] – J. J. Cox, G. T. Horne, R. F. Mehl, *Trans. Am. Soc. Metals*, 49, 118 (1957)
- [Diawara 2007] – B. Diawara, stage de master IMAPC, Université Louis Pasteur de Strasbourg – eDF
- [Domain 2005] – C. Domain, G. Monnet, *Phys. Rev. Lett.*, 95, 215506 (10) (2005)
- [Duesbery 1991] – M. S. Duesbery, G. Y. Richardson, *Solid State and Materials Sciences*, 14, 46 (1991)
- [Escaig 1966] – B. Escaig, *J. Phys. Paris*, 27, C3-205 (1966)
- [Ferriss 1962] – D. P. Ferriss, R. M. Rose, J. Wuff, *Trans. A.I.M.E.*, 224, 975 (1962)
- [Fleischer 1962] – R. Fleischer, *J. App. Phys.*, 33, 3504 (1962)
- [Foxall 1967] – R. A. Foxall, M. S. Duesbery, P. B. Hirsch, *Can. J. Phys.*, 45, 607 (1967)
- [Franciosi 1983] – P. Franciosi, *Acta Metall.*, 31, 1331 (1983)
- [Frederiksen 2003] – S. Frederiksen, K. Jacobsen, *Phil. Mag.*, 83, 365 (2003)
- [Garlick 1964] – R. G. Garlick, H. B. Probst, *Trans. A.I.M.E.*, 230, 1120 (1964)
- [Gibala 1973] – R. Gibala, T. E. Mitchell, *Scripta Metall.*, 7, 1143 (1973)
- [Haušild 2002] – P. Haušild, Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Paris (2002)
- [Honeycombe 1968] – R. W. K. Honeycombe, dans « *The plastic deformation of metals* », ed: Edward Arnold Ltd., London (1968)
- [Hull 1963] – D. Hull, *Proc. Roy. Soc.*, A274, 5 (1963)
- [Irwin 1974] – G. J. Irwin, F. Guiu, P. L. Pratt, *Phys. Stat. Sol. (a)*, 22, 685 (1974)
- [Jaoul 1960] – B. Jaoul, D. Conzalez, *J. Mech. Phys. Solids*, 9, 16 (1960)
- [Karlik 2003] – M. Karlik, I. Nedbal, J. Siegl, *Mater. Sci. Eng.*, A00, 1 (2003)
- [Keh 1967] – A. S. Keh, Y. Nakada, *Can. J. Phys.* 45, 1101 (1967)
- [Keh 1968] – A. S. Keh, Y. Nakada, *Trans. JIM*, 9, 876 (1968)
- [Kitajima 1979] – K. Kitajima, Y. Aono, H. Abe, E. Kuramoto, *Scripta. Metall.*, 13, 1033 (1979)
- [Kitajima 1982] – K. Kitajima, E. Kuramoto, Y. Aono, H. Abe, Conference: « *Mechanical Properties of BCC Metals* », Hawaii, 111 (1982)

- [Kroupa 1967] – F. Kroupa, V. Vitek, *Can. J. Phys.*, 45, 945 (1967)
- [Kubin 1973] – L. P. Kubin, B. Jouffrey, *Phil. Mag.*, 27, 1369 (1973)
- [Kubin 1976] – L. P. Kubin, «The low temperature plastic deformation of bcc metals», dans: «Reviews on the Deformation Behavior of Materials I», 243 (1976)
- [Kubin 1982] – L. P. Kubin, «The low temperature mechanical properties of bcc metals and their alloys», dans: «Reviews on the Deformation Behavior of Materials II», 181 (1982)
- [Kubin 1999] – L.P. Kubin, B. Devincere, «Dislocation mechanisms to dislocations microstructures and strain hardening», dans: « Deformed-Induced Microstructures: Analysis and Relation to Properties», Ed: B. J. Bilde-Sorensen, Risoe National Laboratory, Roskilde, Danemark, 61 (1999)
- [Kumagai 1990] – J. Kumagai, *Mater. Sci. Eng.*, A129, 207 (1990)
- [Kuramoto 1979] – E. Kuramoto, A. Aono, K. Kitajima, *Scripta Metall.*, 13, 1039 (1979)
- [Lawley 1964] – A. Lawley, H. L. Gaicher, *Phil. Mag.*, 10, 15 (1964)
- [Lechenmann 1970] – R. Lechenmann, H. Schultz, *Scripta Metall.*, 4, 709 (1970)
- [Libert 2007] – M. Libert, Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Paris (2007)
- [Louchet 1975] – F. Louchet, L. P. Kubin, *Acta Met.*, 23, 17 (1975)
- [Low 1944] – J. R. Low, Jr., M. Gensamer, *Trans. Amer. Inst. Min. (Metall.) Engrs.*, 158, 207 (1944)
- [Low 1961] – J. R. Low, Jr., A. M. Turkalo, *Acta Metall.* 10, 215 (1961)
- [Madec 2002] – R. Madec, B. Devincere, L. P. Kubin, *Scripta Mater.*, 47, 689 (2002)
- [Margolin 1999] – B. Z. Margolin, V. A. Shvetsova, A. G. Gulenko, *Int. J. of Press. Vessels and Piping*, 76, 715 (1999)
- [Martin 1999] – I. Martin, stage de fin d'études, Ecole Centrale de Paris – eDF (1999)
- [Mathieu 2006] – J. P. Mathieu, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers (2006)
- [Miloudi 1997] – S. Miloudi, Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay (1997)
- [Mitchell 1963] – T. E. Mitchell, R. A. Foxall, P. B. Hirsh, *Phil. Mag.* 8, 1895 (1963)
- [Mitchell 1965] – T. E. Mitchell, W. A. Spitzig, *Acta Metall.*, 13, 1169 (1965)
- [Monnet 2006] – G. Monnet, Observations réalisées au MEB au sein du Département MMC-eDF-Site des Renardières (2006)
- [Novaha 2003] – J. Novaha, P. Haušild, M. Karlik, P. Bompard, *Mater. Charact.*, 49, 211 (2003)
- [Obertlik 2005] – K. Obertlik, C. F. Robertson, B. Marini, *J. Nucl. Mater.*, 342, 35 (2005)
- [Ortner 2003] – S.R. Ortner, J. Duff, D.W. Beardsmore, rapport Serco Assurance SA/EIG/15234/R003 (2003)
- [Osetsky 2003] – Y. N. Osetsky, D. J. Bacon, *J. Nucl. Mater.*, 323, 268 (2003)
- [Pareige 1994] – P. Pareige, Thèse de doctorat, Université de Rouen (1994)
- [Pesci 2004] – R. Pesci, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers (2004)
- [Quesnel 1975] – D. J. Quesnel, A. Sato, M. Meshii, *Mater. Sci. Eng.*, 18, 199 (1975)

- [Queyreau 2008] – S. Queyreau, Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie (2008)
- [Reid 1966] – C. N. Reid, A. Gilbert, G. T. Hahn, *Acta Metall.*, 14, 975 (1966)
- [Renevey 1998] – S. Renevey, Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay (1998)
- [Richter 1970] – J. Richter, *Phys. Stat. Sol.* 40, 565 (1970)
- [Robertson 2007] – C. F. Robertson, K. Obrtlík, B. Marini, *J. Nucl. Mater.*, 366, 58 (2007)
- [Rodney 1999] – D. Rodney, R. Phillips, *Phys. Rev. Lett.*, 82(8), 1704 (1999)
- [Sato 1973] – A. Sato, M. Meshii, *Acta Metall.*, 21, 753 (1973)
- [Schadler 1960] – H. W. Schadler, *Trans. A.T.M.E.*, 218, 649 (1960)
- [Šestak 1967] – B. Šestak, N. Zárubová, V. Sládek, *Cand. J. Phys.*, 45, 1031 (1967)
- [Šestak 1979] – B. Šestak, *Kristall und Technik*, 14, 1298 (1979)
- [Sestier 1998] – K. Sestier, Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble (1998)
- [Spitzig 1970a] – W. A. Spitzig, A. S. Keh, *Acta Metall.*, 18, 1021 (1970)
- [Spitzig 1970b] – W. A. Spitzig, A. S. Keh, *Metall. Trans.*, 1, 2751 (1970)
- [Spitzig 1970c] – W. A. Spitzig, A. S. Keh, *Acta Metall.*, 18, 611 (1970)
- [Spitzig 1973] – W. A. Spitzig, *Mater. Sci. Eng.*, 12, 191 (1973)
- [Spitzig 1981] – W. A. Spitzig, *Mater. Sci. Eng.*, 50, 229 (1981)
- [Stein 1963] – D. F. Stein, J. R. Low, *Acta Metall.*, 14, 1183 (1966)
- [Stein 1966] – D. F. Stein, *Acta Metall.*, 14, 99 (1966)
- [Suzuki 1979] – H. Suzuki, «Solution hardening in body-centred cubic alloys», dans: «Dislocations in Metallurgy», ed.: F.R. N. Nabarro, North Holland, Amsterdam, 4, 191 (1979)
- [Takeuchi 1967] – S. Takeuchi, E. Furubayashi, T. Taoka, *Acta Metall.*, 15, 1179 (1967)
- [Takeuchi 1968] – T. Takeuchi, *Transactions ISIJ*, 8, 251 (1968)
- [Takeuchi 1972] – T. Takeuchi, J. Mano, *Acta Metall.*, 20, 809 (1972)
- [Tanguy 2001] – B. Tanguy, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris (2001)
- [Tanguy 2005] – B. Tanguy, J. Besson, R. Piques, A. Pineau, *Eng. Frac. Mech.*, 72, 49 (2005)
- [Taoka 1964] – T. Taoka, S. Takeuchi, E. Furubayashi, *J. Phys. Soc. Japan*, 19, 701 (1964)
- [Tapasa 2007] – K. Tapasa, A. V. Bulatov, D. J. Bacon, Y. N. Osetsky, *J. Nuc. Mater.*, 361, 52 (2007)
- [Taylor 1965] – G. Taylor, J. W. Christian, *Acta Metall.*, 13, 1216 (1965)
- [Vesely 1968] – D. Vesely, *Phys. Stat. Sol.*, 29, 685 (1968)
- [Vitek 1968] – V. Vitek, F. Kroupa, *Czech. J. Phys.*, 18, 464 (1968)
- [Vitek 1969] – V. Vitek, F. Kroupa, *Phil. Mag.*, 19, 265 (1969)
- [Vitek 1974] – V. Vitek, *Crys. Latt. Def.*, 5, 1, (1974)
- [Wasserbäch 1986] – W. Wasserbäch, *Phil. Mag. A*, 53, 335 (1986)
- [Yang 2003] – W. J. Yang, B. S. Lee, M. Y. Huh, J. H. Hong, *J. of Nucl. Mat.*, 317, 234 (2003)

Chapitre II

Détermination des lois de mobilité des dislocations à l'échelle mésoscopique

Table de matières

Introduction	36
1- Mouvement des dislocations à basse température	36
1.1- Structure de cœur de la dislocation vis	36
1.2- Mouvement et mécanisme du double-décrochements	38
1.3- Mouvement des dislocations coin	39
1.4- Le stade 0 : conséquence de l'anisotropie de mobilité des dislocations	40
2- Les facteurs de l'activation thermique.....	41
2.1- Entropie d'activation.....	41
2.2- Dépendance en température	42
2.3- Effet de la contrainte	42
3- Détermination des grandeurs caractéristiques	43
3.1- Détermination de la contrainte effective en fonction de la température	43
3.2- Détermination de l'énergie d'activation en fonction de la contrainte effective....	44
3.3- Comparaison avec les autres estimations dans la littérature	46
4- Comparaison avec la théorie.....	47
4.1- Tension de ligne couplée à un potentiel de Peierls	47
4.2- Approche en force	48
5- Mobilité des dislocations à l'échelle mésoscopique	50
5.1- Dislocations vis	50
5.2- Dislocations non-vis.....	52
Conclusions	53
Références bibliographiques	54

Introduction

Dans le chapitre I, nous avons vu quelques aspects de la déformation macroscopique du fer, de la ferrite et de l'acier de cuve. L'origine de ce comportement mécanique particulier étant microscopique, nous nous orientons dans ce chapitre vers la caractérisation à l'échelle microscopique, voire atomique, du mouvement des dislocations. Cette caractérisation nous permet d'établir les règles nécessaires à l'analyse des résultats expérimentaux qui vont nous permettre de déduire les grandeurs d'intérêt à l'échelle mésoscopique. Ainsi, les lois de mobilité, seules données d'entrée du code de simulations de dynamique des dislocations, peuvent être établies sur la base physique du glissement.

1- Mouvement des dislocations à basse température

Comme on l'a déjà mentionné, les dislocations vis ont une mobilité faible à basse température. Cette caractéristique est liée à la présence d'une forte friction du réseau due à une structure du cœur compacte. Le déplacement de ces dislocations est contrôlé par le mécanisme du double-décrochements.

1.1- Structure de cœur de la dislocation vis

Dans la structure CC, étant donné que les directions des vecteurs de Burgers sont parallèles aux directions $\langle 111 \rangle$, la dislocation vis peut se situer dans deux positions (ou triangles) différentes (figure (1)). Dans la direction $[111]$, le réseau est constitué de la succession de trois couches atomiques distinctes, espacées de $b/3$. Si on considère un sens positif de rotation autour de cette direction, la position atomique varie de 0, $b/3$ et $2b/3$ dans un triangle sur deux, alors qu'elle varie de 0, $2b/3$ et $b/3$ dans les triangles adjacents. En superposant à ce décalage naturel du réseau, le champ de déformation de la dislocation (0, $b/3$, $2b/3$), deux configurations peuvent avoir lieu, « soft » et « hard ». Dans un triangle sur deux, la rotation de la position atomique s'inverse, on parle dans ce cas de la configuration « soft » ou facile. Tandis que dans les autres triangles, la position des trois atomes se retrouve dans le même plan (111). Cette dernière configuration conduit à une compression forte de la maille, ce qui justifie le nom donné dans la littérature, « hard » ou difficile (pour une revue, cf. [Kubin 1976]).

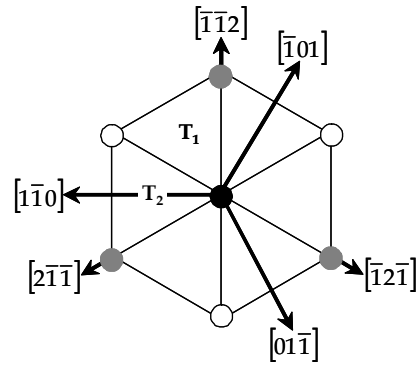


Figure 1 - Projection des trois plans (111) de la structure CC. Les cercles dénotent les atomes et les trois couleurs renvoient aux trois couches atomiques successives dans la direction [111], espacées de $b/3$. T_1 et T_2 sont les deux types de triangles pouvant contenir le cœur de la dislocation vis.

Les premières simulations atomiques de Dynamique Moléculaire (DM) utilisant des potentiels empiriques [Simonelli 1993 – Ackland 1997] ont révélé une structure du cœur étalée dans trois plans de type $\{110\}$ (cf. par exemple [Wen 2000 – Harry 2002 – Osetsky 2003 – Marian 2004]). Les simulations récentes *ab initio* [Domain 2005] ont montré que la structure du cœur dans le triangle facile n'est pas étalée, alors que dans le triangle difficile, elle adopte une configuration particulière ne correspondant pas à la solution élastique. L'apparition de nouveaux potentiels empiriques [Mendelev 2003 – Ackland 2004], ont permis aux simulations DM de reproduire la structure du cœur prédite par *ab initio* [Domain 2005 – Chaussidon 2006] (figure (2)).

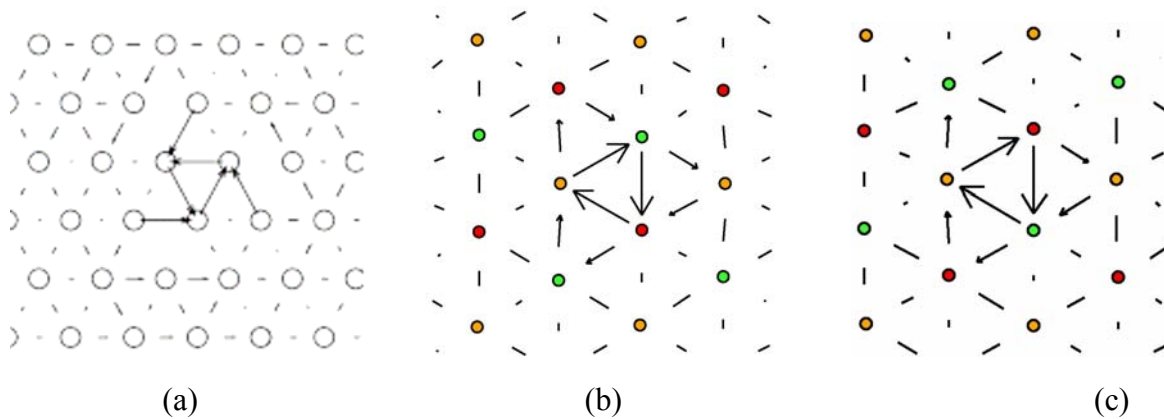


Figure 2 - Structure du cœur obtenue par (a) DM utilisant le potentiel de Simonelli et *al.* [Chaussidon 2006] ; (b) DM utilisant le potentiel de Mendelev et *al.* [Domain 2005] et (c) *ab initio* [Domain 2005]. Représentation de Vitek [Vitek 1970] : les colonnes d'atomes sont indiquées par des cercles et les flèches symbolisent le déplacement relatif des atomes.

1.2- Mouvement et mécanisme du double-décrochements

L'application d'une cisssion sur une dislocation conduit au déplacement de celle-ci. Lorsque le cœur de la dislocation est bien étalé ou dissocié, la contrainte critique nécessaire au déplacement est faible. Ceci constitue le cas des matériaux de structure CFC [Bulatov 2006]. Compte tenu du cœur compact de la dislocation vis dans le fer, la résistance du réseau au mouvement de la dislocation est sensé être très élevée. Les simulations DM montrent qu'à la température du zéro absolu, la dislocation vis se déplace d'une façon rigide [Chaussidon 2006] après avoir appliqué une cisssion très élevée, de l'ordre du GPa. Mais à une température finie, Seeger et Schiller [Seeger 1962] ont suggéré un autre mécanisme activé thermiquement : germination d'un double-décrochements dans la vallée de Peierls voisine, suivie par la propagation à grande vitesse des deux décrochements, mettant la dislocation entièrement dans le triangle voisin.

La première évidence directe concernant le mécanisme du double-décrochements vient des simulations de DM réalisées par Domain et Monnet [Domain 2005]. Ces simulations ont montré qu'après une longue période d'incubation, d'abord un double-décrochements est formé, suivi par une propagation des décrochements à la vitesse du son mettant la dislocation partiellement dans le triangle difficile (*cf.* figure (3)). Ces événements sont suivis rapidement par la germination d'un autre double-décrochements dans le deuxième triangle stable, suivie par une longue période d'incubation. Ainsi la dislocation se déplace par une succession de deux doubles-décrochements. La période d'attente correspond toujours à la position de la dislocation dans le triangle facile. La dislocation reste dans le plan de glissement de type $\{110\}$.

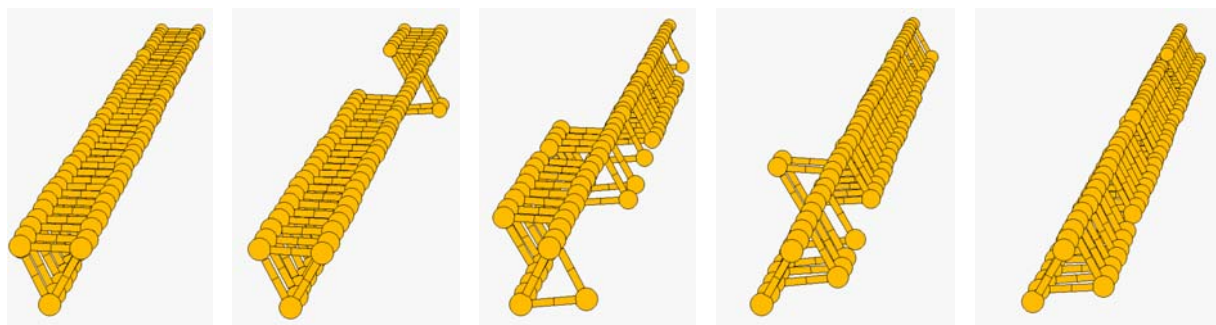


Figure 3 - Simulation DM du mouvement de la dislocation vis à 75 K [Domain 2005]. De droite à gauche : germination et propagation du double-décrochements.

L'énergie d'activation thermique conduisant à la germination est de plus en plus disponible lorsque la température augmente. Par conséquent, la contrainte critique doit baisser quand la température augmente, ce qui est confirmé par l'expérience [Spitzig 1970a, 1970b, 1973]. Il est donc réaliste de considérer que la germination des doubles-décrochements est l'étape contrôlant la mobilité des dislocations vis à basse température.

1.3- Mouvement des dislocations coin

Les structures du cœur de la dislocation coin et des dislocations d'autres caractères mixtes, se distinguent de celle de la dislocation vis par la présence d'une composante du déplacement planaire dans le plan contenant la ligne du glissement et le vecteur de Burgers. Ceci restreint le déplacement de ces dislocations à un plan, appelé plan de glissement.

Les simulations de DM récentes de la dislocation coin dans le fer [Osetsky 2003] ont montré que le mouvement rigide de la dislocation dans le plan (110) a lieu à partir de quelques dizaines de MPa (dépendant du potentiel considéré). La contrainte critique décroît rapidement avec la température. A température ambiante la dislocation coin est susceptible de se déplacer à des contraintes très faibles, difficile à mesurer par DM malgré la prise en compte d'une vitesse de déformation très élevée, de l'ordre de 10^6 s^{-1} .

Au niveau expérimental, la vitesse des dislocations a été mesurée en déterminant la position de la dislocation avant et après l'application d'une contrainte donnée pendant un intervalle du temps fixe [Urabe 1975]. Ces mesures, bien qu'imprécises, permettent d'avoir des ordres de grandeur de la vitesse des dislocations. Les résultats confirment la mobilité élevée des dislocations coin par rapport aux dislocations vis.

Ici, il faut noter un aspect important concernant le fer : l'effet du carbone. Alors que l'effet sur le mouvement de la dislocation vis est sujet à controverse [Kubin 1979a, 1979b], la dislocation coin est supposée réagir fortement avec les atomes du carbone en position tétragonale [Tapasa 2007a, 2007b]. Ceci en raison de la forte dilatation du réseau qui réagit avec la composante hydrostatique du champ de déformation de la dislocation coin. La distorsion du réseau s'étend à des distances relativement élevées, de l'ordre de $10b$, [Tapasa 2007a]. Respectivement, les énergies d'interaction sont de 0,41 et de 0,66 eV entre l'atome du carbone et les dislocations vis et coin [Clouet 2008]. Etant donné les grands volumes d'activation associés, une composante non négligeable du durcissement de la solution solide est de nature athermique (*cf.* discussion dans le travail de Mott et Nabarro [Mott 1940]). Cette composante peut être associée à un seuil d'écoulement, ou à une friction d'alliage, τ_f , qui ne dépend pas de la température. A basse température et au-dessus de cette contrainte, une activation thermique semble nécessaire pour permettre à la dislocation coin de vaincre la solution solide. Le mouvement de la dislocation coin est donc aussi activé thermiquement, mais avec des énergies d'activation plus faibles que les énergies d'activation associées à la germination du double-décrochements.

Compte tenu de ces aspects complexes de la mobilité des dislocations non-vis et du manque de caractérisation au niveau expérimental, la variation de la vitesse des dislocations non-vis en fonction de la température et de la contrainte reste mal connue. Toutefois, les observations expérimentales et les simulations DM confirment que la mobilité des dislocations non-vis est largement plus élevée que celle des dislocations vis.

1.4- Le stade 0 : conséquence de l'anisotropie de mobilité des dislocations

Comme nous l'avons vu dans le paragraphe précédent, seules les dislocations vis sont soumises à une forte friction du réseau dans le fer. Par conséquent, l'activation des sources de Frank-Read, étape préliminaire de la déformation plastique, doit s'effectuer d'une façon particulière (cf. figure (4)). En effet, lors du chargement du cristal, d'abord les sections de caractère non-vis commencent à se déplacer parallèlement au vecteur de Burgers lorsque la contrainte atteint leur propre contrainte critique τ_a , appelée dans la littérature « microyield stress ».

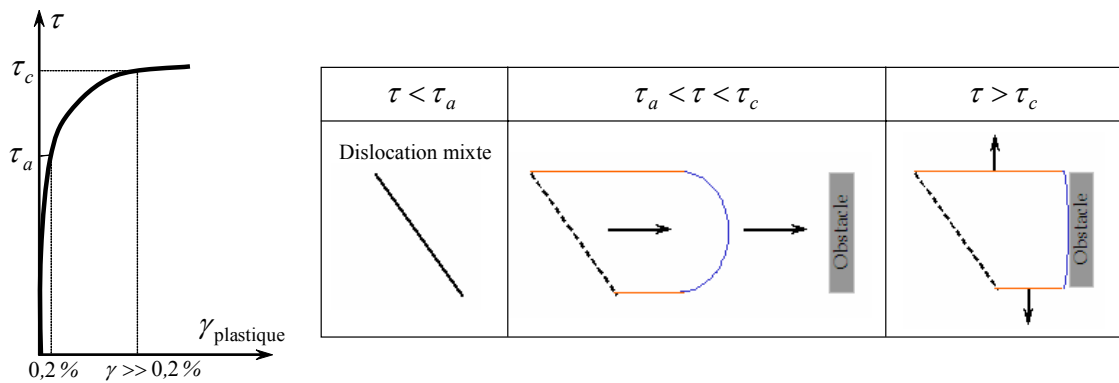


Figure 4 - Fonctionnement d'une source de Frank-Read dans le fer déformé à basse température

Le mouvement des sections non-vis provoque un allongement des sections vis, immobiles à ce niveau de contrainte. En général, après un certain parcours, les dislocations non-vis finissent par être arrêtées devant les obstacles habituels du cristal, comme les sous-joints, les précipités, les joints du grain, etc. La contrainte augmente alors au fur et à mesure que la densité des dislocations non-vis mobiles s'épuise, conduisant à un fort écrouissage. Il s'agit du premier stade de déformation, appelé « stade 0 ».

Dans la figure (5), nous pouvons comparer les microstructures dans le fer déformé à 77 et à 300 K [Solomon 1966, Takeuchi 1967]. A basse température (77 K), nous pouvons distinguer clairement l'allongement des dislocations vis, alors qu'à haute température (300 K) la microstructure ressemble plutôt aux microstructures de déformation dans le stade I des matériaux de structure CFC.

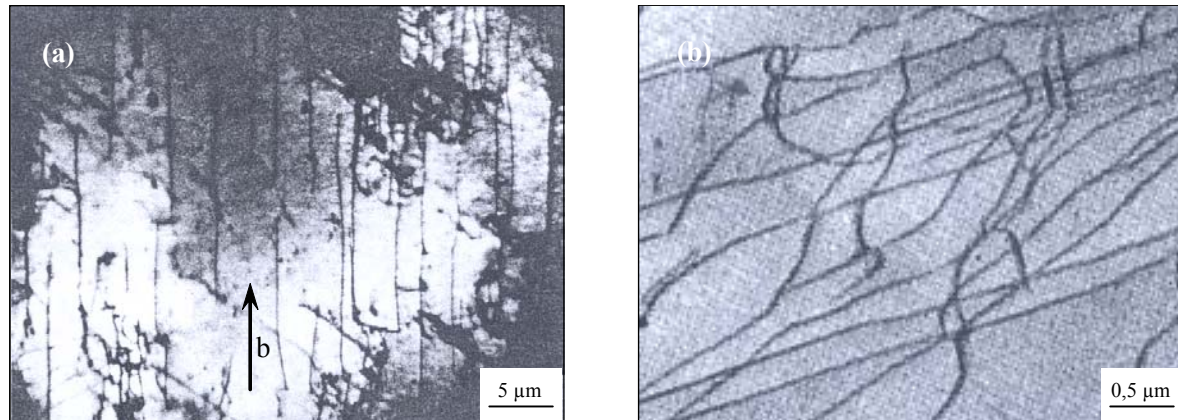


Figure 5 - Microstructure des dislocations dans le fer déformé à (a) 77 K [Solomon 1966], et (b) 300 K [Takeuchi 1967]. Vue dans le plan (011)

Durant le stade 0, la déformation acquise est de nature anélastique : le déchargement mécanique conduit le cristal à retrouver ses dimensions initiales [Solomon 1971]. Par conséquent, la déformation est, au niveau macroscopique, réversible mais reste dissipative à cause du mouvement des dislocations non-vis. On peut aussi noter qu'à ce stade de la déformation, et à cause de l'immobilité des dislocations vis, la densité des dislocations mobiles n'évolue que très peu tandis que la densité totale évolue fortement [Boudet 1975].

Enfin, il semble important de noter qu'en plus de la température, l'étendue du stade 0 dépend des impuretés et de la structure initiale des dislocations. Boudet et Kubin [Boudet 1975] et Solomon et Mc Mahon [Solomon 1971] ont étudié l'effet des impuretés et leur résultat montre que l'étendue de ce stade diminue quand le taux d'impuretés augmente. Cet effet a été expliqué par une forte interaction des dislocations de caractère non-vis avec les impuretés. Dans d'autres travaux [Takeuchi 1972], l'effet de la structure initiale des dislocations a été étudié à travers des pré-déformations des échantillons à différentes températures situées à la fois dans le régime thermique et dans le régime athermique. Une pré-déformation à chaud conduit à l'augmentation de l'étendue du stade 0 lors de la déformation à froid. La ductilité du fer à basse température augmente lorsque le matériau est pré-déformé à chaud.

2- Les facteurs de l'activation thermique

2.1- Entropie d'activation

L'énergie de formation du double-décrochements ΔG dépend de la température et de la contrainte. Elle est généralement connue sous la formulation :

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S, \quad (1)$$

où ΔH est l'enthalpie d'activation et ΔS l'entropie d'activation. La contribution essentielle de l'entropie d'activation est associée à la variation du module de cisaillement avec la

température [Schöeck 1965]. Dans le cas particulier du fer, elle est considérée négligeable devant ΔH [Canrad 1960]. Spitzig et Keh [Spitzig 1970b] ont évoqué une contribution de l'entropie de seulement 5%. De ce fait, dans ce travail, le terme de l'entropie sera négligé et aucune distinction entre ΔG et ΔH ne sera faite.

2.2- Dépendance en température

A une vitesse de déformation constante, les mesures expérimentales ont montré que, dans le fer, l'énergie d'activation est proportionnelle à la température [Schöeck 1980 – Spitzig 1973]. ΔH peut, donc, être donnée par la relation :

$$\Delta H = C kT, \quad (2)$$

où k est la constante de Boltzmann et C une constante égale approximativement à 25 [Cagnon 1971 – Spitzig 1973].

Cette relation ne peut pas être utilisée à l'échelle mésoscopique, car le véritable facteur contrôlant le comportement local de la dislocation est la contrainte effective. Mais, nous verrons dans les paragraphes qui suivent comment cette relation a été indispensable à notre nouvelle analyse de la contrainte critique.

2.3- Effet de la contrainte

L'affranchissement des barrières activées thermiquement dépend de deux facteurs : la contrainte locale fournissant une quantité donnée du travail mécanique W et le temps nécessaire pour donner une chance aux fluctuations thermiques de fournir l'énergie d'activation, c'est-à-dire l'énergie mécanique qui reste à fournir du fait que la contrainte locale est inférieure à la contrainte de Peierls.

Ici, il faut distinguer deux composantes pour la cission macroscopique. La première résulte de la résistance aux obstacles athermiques, c'est-à-dire dont la force ne dépend pas de la température (les interactions entre dislocations par exemple). Ces obstacles nécessitent la courbure des dislocations pour être affranchis. Par conséquent, la composante athermique, appelée τ_μ , est proportionnelle à la tension de ligne, c'est-à-dire au module de cisaillement μ . La deuxième composante est reliée à la friction du réseau et est activée thermiquement. Puisqu'il s'agit de la contrainte disponible pour l'affranchissement des vallées de Peierls, une fois la composante athermique soustraite, cette composante est appelée contrainte effective τ^* .

Pour résumer, la contrainte d'écoulement doit vaincre les deux résistances. A l'état stationnaire, nous pouvons écrire la contrainte critique τ_c associée à une vitesse de déformation constante comme suit :

$$\tau_c = \tau_\mu + \tau^* \quad (3)$$

Dans le cas où le profil énergétique de la barrière de Peierls ne dépend pas de la température, alors il suffit de déterminer l'énergie d'activation en fonction de la contrainte effective.

3- Détermination des grandeurs caractéristiques

Dans la littérature, nous disposons d'un certain nombre d'investigations sur la contrainte d'activation [Keh 1968 – Spitzig 1970a, 1973 – Quesnel 1975 – Kuramoto 1979]. La démarche consiste en général en deux étapes : la détermination de la contrainte critique en fonction de la température à une vitesse de déformation donnée et la détermination de l'énergie d'activation (ou volume d'activation) en fonction de la température. La deuxième étape est relativement fiable et nous pouvons faire confiance à sa précision expérimentale. Nous pouvons donc considérer que la relation $\Delta H(T)$ est connue. En revanche, Il n'en a pas de même pour la contrainte critique en fonction de la température. L'idée est de (i) relever la contrainte critique sur les courbes de traction expérimentales en fonction de la température ; (ii) déduire la variation de la contrainte effective en fonction de la température ; (iii) associer à chaque température une énergie d'activation et une contrainte effective afin de déduire l'évolution de l'énergie d'activation en fonction de la contrainte effective.

3.1- Détermination de la contrainte effective en fonction de la température

On a vu dans le paragraphe 1.4 que le stade 0 de pré-déformation est limité par deux seuils, le premier correspond au début du mouvement des dislocations non-vis et le deuxième correspond au premier déplacement des dislocations vis. On a vu aussi que le mouvement des dislocations non-vis procure une déformation anélastique, tandis que celui des dislocations vis a un caractère irréversible, spécifique de la déformation plastique. A partir de là, la contrainte critique doit être relevée à la fin de ce stade. Les valeurs de la contrainte critique disponibles dans la littérature correspondent aux valeurs conventionnelles, $R_{0,2\%}$ et coïncident avec ce qu'appellent Solomon et Mc Mahon [Solomon 1971] et Brown et Ekvall [Brown 1962] « microyield stress ». Le relevé de la contrainte critique doit, donc, se faire à la fin du domaine de fort écrouissage. Or, dans la plupart des travaux de la littérature, on a négligé cet aspect. Nous ne pouvons donc pas nous fier aux courbes $\tau_c(T)$ publiées.

Pour déterminer la contrainte critique en fonction la température, on a recherché toutes les courbes expérimentales de traction sur des monocristaux de fer disponibles dans la littérature. Seuls les échantillons ayant des orientations proches du centre du triangle standard ont été sélectionnés afin de s'assurer que seuls les systèmes de glissement $\langle 111 \rangle \{110\}$ sont activés. Les essais sont effectués sur des monocristaux de fer à différents taux de carbone, à une vitesse de déformation d'environ 10^{-4} s^{-1} . Sur ces courbes, nous avons relevé les deux limites : conventionnelle, $R_{0,2\%}$ et critique selon notre définition. Les résultats sont montrés dans la figure (6).

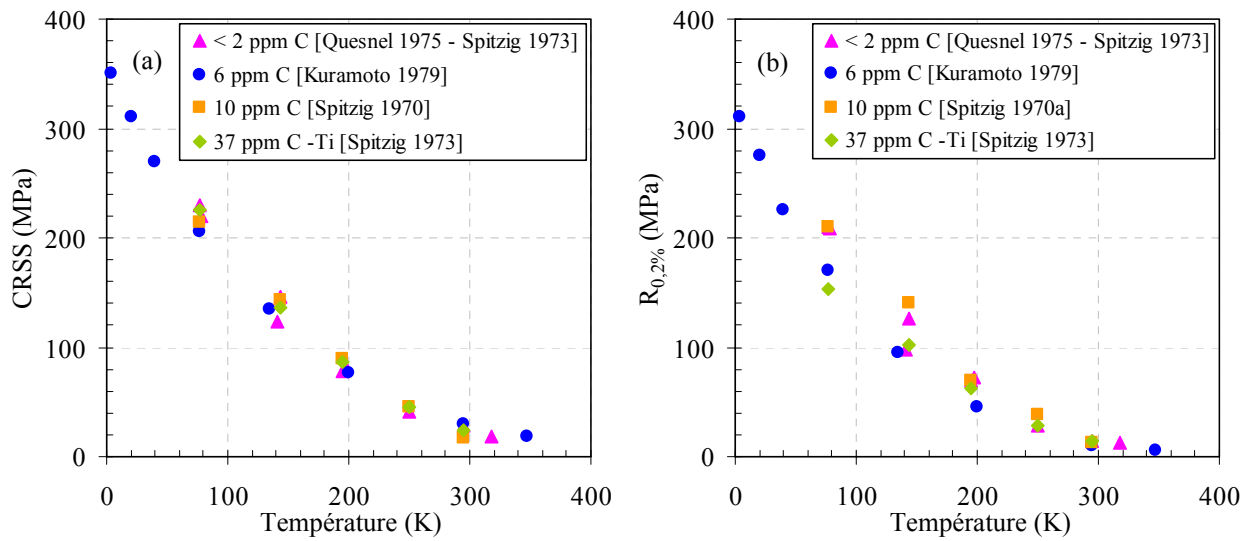


Figure 6 - Variation de la contrainte critique (a) et de la contrainte conventionnelle $R_{0,2\%}$ (b) en fonction de la température pour des monocristaux de fer contenant différents taux de carbone. La vitesse de déformation est 10^{-4} s^{-1} .

Les valeurs de la contrainte critique sont systématiquement plus élevées que celles de la limite conventionnelle $R_{0,2\%}$. La transition entre le régime thermique et le régime athermique est située à environ 300 K. Il faut noter aussi qu'à travers cette figure et pour les taux de carbone considérés, la contrainte critique est moins sensible au carbone que la limite conventionnelle $R_{0,2\%}$. Ce résultat est évoqué dans d'autres travaux [Boudet 1975 – Solomon 1971].

Le calcul de la contrainte effective nécessite une estimation plausible de la contrainte athermique τ_μ . Puisque cette dernière est proportionnelle à μ , alors nous pouvons déduire la contrainte athermique à n'importe quelle température à travers la relation suivante:

$$\tau_\mu(T) = \frac{\tau_\mu(300K)}{\mu(300K)} \mu(T) \quad (4)$$

La fonction $\mu(T)$ est connue à partir des résultats expérimentaux [Dever 1972]. Les valeurs de τ_μ ont été déterminées en fonction de la température. Compte tenu de la variation négligeable du module de cisaillement avec la température, nous considérons que la contrainte critique τ_μ est constante et est égale à 8 MPa qui correspond à la moyenne des valeurs trouvées. Cette contrainte correspond à la contrainte athermique due à la friction d'alliage. Dans la suite, elle sera notée, τ_f .

3.2- Détermination de l'énergie d'activation en fonction de la contrainte effective

Connaissant les deux fonctions : $\Delta H(T)$ et $\tau^*(T)$, nous pouvons déduire $\Delta H(\tau^*)$. Les résultats de nos calculs sont exposés dans la figure (7). Nous pouvons constater sur cette figure que la teneur en carbone ne modifie pas d'une façon significative l'énergie d'activation. Ceci rejoint le fait que la contrainte critique ne change pas sensiblement avec la teneur de carbone (*cf.*

figure (6)). Il est possible que l'énergie d'activation dépende de la concentration du carbone, mais son effet, s'il y en a un, est certainement compris dans la barre d'erreur de mesure de cette énergie.

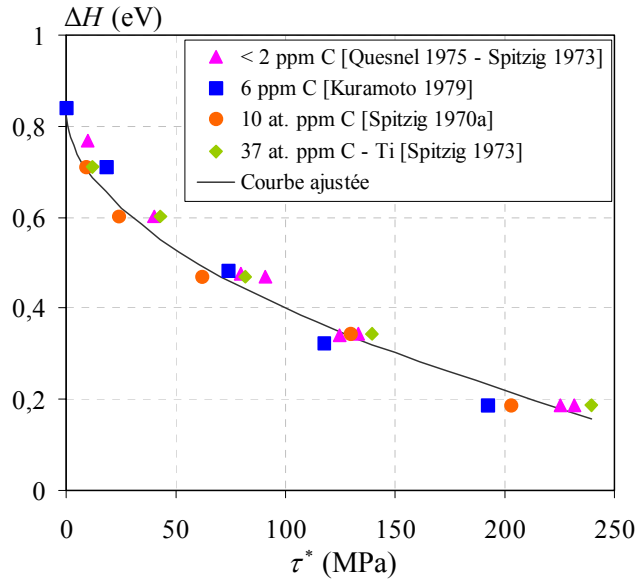


Figure 7 - Evolution de l'énergie d'activation en fonction de la contrainte effective (essais de traction à $\dot{\epsilon} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ sur monocristaux de fer contenant différents taux de carbone).

A basse température, la contrainte effective est élevée et l'énergie d'activation est donc faible, et *vice versa*. Nous retrouvons, donc, à travers la figure (7), la dépendance en température.

Afin de rendre compte de l'effet de la contrainte effective, nous cherchons une fonction analytique de la forme [Kocks 1975] :

$$\Delta H = \Delta H_0 \left(1 - \left(\frac{\tau^*}{\tau_0} \right)^p \right)^q, \quad (5)$$

où ΔH_0 est l'énergie de Peierls correspondant à l'énergie d'activation maximale, p et q sont deux constantes et τ_0 est une constante correspondant à l'extrapolation de τ^* à 0 K. La procédure d'ajustement donne les valeurs suivantes :

$\Delta H_0 = 0,84 \text{ eV}$	$\tau_0 = 363 \text{ MPa}$	$p = 0,5$	$q = 1$
--------------------------------	----------------------------	-----------	---------

A partir de ces valeurs, on peut écrire la variation de l'énergie d'activation comme suit :

$$\Delta H = \Delta H_0 \left(1 - \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_0}} \right) \quad (6)$$

3.3- Comparaison avec les autres estimations dans la littérature

Les valeurs de τ_0 et de ΔH_0 trouvées ne sont pas très éloignées d'autres estimations dans la littérature. Le tableau suivant montre quelques exemples :

	τ_0 (MPa)	ΔH_0 (eV)
[Keh 1967]	290	----
[Keh 1968]	----	0,67
[Smidt 1969]	330	0,84
[Spitzig 1970a]	360	----
[Spitzig 1970b]	370	0,7
[Spitzig 1973]	350 - 370	0,78 - 0,84
[Kuramoto 1979]	360	----

Tableau 1 - Comparaison avec les valeurs de ΔH_0 et de τ_0 reportées dans la littérature

En s'appuyant sur des résultats expérimentaux, Smidt [Smidt 1969] a établi une formulation empirique de la contrainte effective en fonction de la température. Des tests de changement de température entre 80 et 300 K ont été effectués à la même vitesse de déformation. A partir de ces tests, la sensibilité de la contrainte effective à la température a été déterminée en fonction de la température (cf. figure (8)).

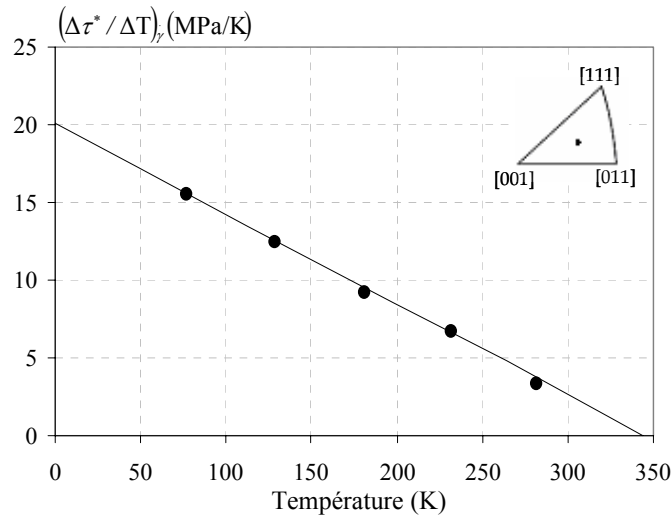


Figure 8 - Sensibilité de la contrainte d'écoulement à la température, $(\Delta\tau^* / \Delta T)_y$, obtenue à partir des essais de sauts de température entre 80 et 300 K pour des monocristaux de fer sollicités en traction à $\dot{\epsilon} = 5,6 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ [Smidt 1969]

Cette figure montre clairement que cette sensibilité est proportionnelle à la température. Il en résulte une dépendance quadratique de la contrainte en fonction de la température. Les résultats de l'ajustement de Smidt montrent une dépendance de la forme :

$$\frac{T}{T_0} = 1 - \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_0}}, \quad (7)$$

où T_0 et τ_0 sont deux constantes. Compte tenu de la proportionnalité de l'énergie d'activation à la température, nous pouvons conclure que nos ajustements sont en bon accord avec les résultats reportés par Smidt.

4- Comparaison avec la théorie

L'estimation de l'énergie d'activation est un problème complexe et implique des modifications du cœur de la dislocation à l'échelle atomique, difficile de prendre en compte dans un cadre théorique. Parmi les différentes approches, deux se distinguent. D'une part, une approche en « forces » négligeant le potentiel de Peierls mais rendant compte des forces d'attraction entre les différents segments de la dislocation [Hirth 1982]. D'autre part, une approche énergétique prenant en compte seulement un potentiel de Peierls associé à un modèle de tension de ligne [Seeger 1962, 1984 – Dorn 1964]. Nous présentons ici deux exemples représentatifs de ces approches et nous les comparons à nos résultats.

4.1- Tension de ligne couplée à un potentiel de Peierls

En couplant un potentiel de Peierls de différents profils à un modèle de tension de ligne, Dorn et Rajnak [Dorn 1964] ont établi des formulations variationnelles de l'énergie de formation du double-décrochements E_{dd} , et de l'énergie d'un décrochement isolé E_{1d} . Le modèle conduit à une formulation différentielle exprimant l'équilibre de la ligne de la dislocation. Les calculs sont complexes et nécessitent une résolution numérique des équations. A chaque potentiel de Peierls, une solution finale est dérivée donnant l'évolution $E_{dd}/2E_{1d}$ et τ^*/τ_0 . Pour l'ensemble des potentiels de Peierls testés, les solutions sont contenues dans un faisceau montré dans la figure (9) et comparé à nos résultats d'ajustement.

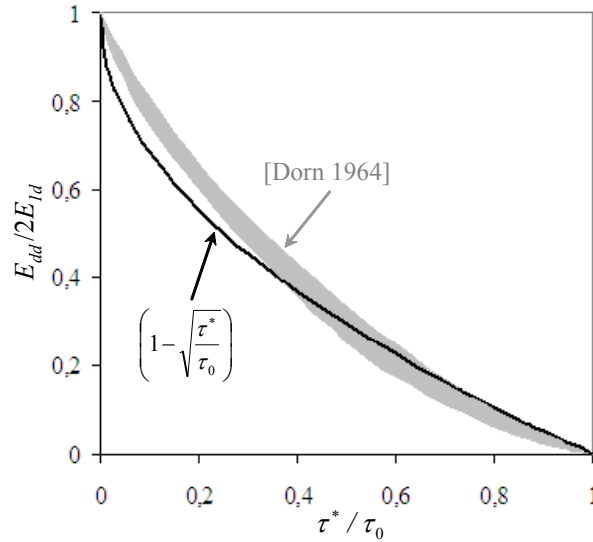


Figure 9 - Comparaison entre $\Delta H/\Delta H_0$ en fonction de τ^*/τ_0 obtenue par Dorn et Rajnak [Dorn 1964] et celle obtenue dans ce travail

La comparaison des courbes montre un accord qualitatif. Ici, il ne faut pas oublier que la résolution des équations de Dorn et Rajnak dépend du potentiel de Peierls utilisé. En outre, une des faiblesses du modèle est l'application du potentiel de Peierls aux décrochements qui, bien entendu, ne sont pas de caractère vis.

4.2- Approche en force

Le modèle de Hirth et Lothe [Hirth 1982] est relativement simple et basé sur le principe de calcul des forces des sections formant le double-décrochements. D'abord deux hypothèses sont nécessaires pour le modèle, $w \ll l$ et $a \ll l$ (cf. figure (10) pour la signification des différentes longueurs). Il s'agit d'une configuration dite à basses contraintes [Seeger 1962], associée à deux décrochements bien espacés géométriquement.

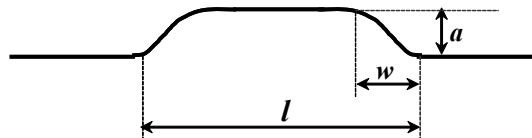


Figure 10 - Configuration d'un double-décrochements selon le modèle de Hirth et Lothe [Hirth 1982]

Dans ce cas, l'énergie totale du double-décrochements en absence de contrainte appliquée s'écrit sous la forme :

$$\Delta H = 2 E_{1d} + E_{int} , \quad (8)$$

où E_{1d} est l'énergie d'un seul décrochement et E_{int} l'énergie d'interaction entre les deux décrochements qui s'écrit :

$$E_{int} = -\mu b^2 \frac{a^2}{8\pi l} \quad (9)$$

Sous une contrainte τ^* , l'énergie d'activation ΔH est obtenue par soustraction du travail fourni par la contrainte durant la formation de cette configuration :

$$\Delta H(\tau^*) = 2E_{1d} - \mu b^2 \frac{a^2}{8\pi l} - \tau^* b a l \quad (10)$$

La configuration adoptée par la dislocation à une contrainte donnée doit minimiser l'énergie de formation de double-décrochements. L'annulation de la dérivée de cette énergie par rapport à la longueur nous donne la relation suivante entre la longueur critique et la contrainte :

$$l_c = \sqrt{\frac{\mu b a}{8\pi \tau^*}} \quad (11)$$

En remplaçant l_c dans l'équation de ΔH , l'énergie d'activation de la configuration critique prend la forme :

$$\Delta H(\tau^*) = 2E_{1d} - \sqrt{\frac{\mu(ab)^3}{2\pi}} \sqrt{\tau^*} \quad (12)$$

Cette dernière équation donne une évolution de ΔH proportionnelle à $(1 - \sqrt{\tau^*/\tau_0})$ ce qui correspond à notre résultat d'ajustement.

Remarque :

Il ne faut pas oublier que ce modèle néglige complètement le potentiel de Peierls. La valeur de τ_0 prédite dans ce modèle (~ 85 MPa) est loin des résultats expérimentaux. L'absence du potentiel dans cette approche a pour conséquence une profondeur du saut, a constante. Par ailleurs, les deux hypothèses $w \ll l$ et $a \ll l$, nécessitent une vérification. Or, les simulations récentes de dynamique moléculaire [Domain 2005] ont montré que même à basse température/très haute contrainte, la configuration critique de la ligne de la dislocation correspond à deux décrochements bien espacés. En plus, tous les sauts observés sont d'amplitude équivalente à une vallée de Peierls. Les deux hypothèses de Hirth et Loth sont largement justifiées et vérifiées par les simulations DM.

Finalement, il faut noter que cette approche a été évoquée dans la littérature par d'autres auteurs [Schöck 1980 – Seeger 1984]. On a choisit de l'appeler « modèle de Hirth et Lothe » vu que ces auteurs donnent tous les détails du calcul.

5- Mobilité des dislocations à l'échelle mésoscopique

La connaissance des détails du mouvement des dislocations à l'échelle atomique facilite la transition à l'échelle supérieure. Mais cette transition n'est pas simple car, entre temps, le caractère atomique des décrochements doit disparaître. Nous verrons dans la suite qu'un modèle statistique est nécessaire pour prendre en compte la nature physique du mécanisme.

5.1- Dislocations vis

Le processus d'activation thermique contrôlant la mobilité des dislocations vis doit être considéré de manière statistique. Il doit rendre compte des moyennes à la fois dans le temps et dans l'espace. Le modèle développé par Tang et *al.* [Tang 1998] semble donner le traitement le plus complet. Il est établi sur une hypothèse de base : la vitesse de la dislocation est contrôlée par la fréquence de germination du double-décrochements, h . Comme nous l'avons vu dans les modèles théoriques – et confirmé par la DM – le saut collectif des atomes pour former le double-décrochements doit s'effectuer sur une longueur critique l_c . h doit correspondre au nombre total d'événements de germination possibles. h résulte donc du produit du nombre de sites de germination, c'est-à-dire L/l_c où L est la longueur du segment de caractère vis considéré, et la fréquence des sauts sur chaque site, ν , s'écrivant sous la forme:

$$\nu \propto \frac{v_D}{l_c} \exp\left(-\frac{\Delta H}{kT}\right), \quad (13)$$

où v_D est la fréquence de Debay du matériau. En multipliant la fréquence de sauts, h , par l'amplitude de saut, qui est de l'ordre de l'espacement atomique b , nous aboutissons à la forme mésoscopique de la vitesse d'une dislocation vis à basse température :

$$v_{vis} = \frac{v_D b L}{l_c l_c} \exp\left(-\frac{\Delta H}{kT}\right) \quad (14)$$

A contrainte fixe, lorsque la température augmente, le facteur de Boltzmann augmente exponentiellement. Comme a montré récemment Nabarro [Nabarro 2003], l'équation (14) conduit à une dérive en vitesse à haute température. En effet, quelle que soit la contrainte effective, le facteur de Boltzmann ne s'annule pas. Pour remédier à ce problème, il faut tenir compte des sauts dans le sens négatif, c'est-à-dire dans le sens opposé à la vitesse moyenne de la dislocation. Or dans ce dernier cas, l'énergie d'activation, ΔH^n , doit correspondre à la somme de la totalité de la barrière énergétique de Peierls, ΔH_o , et du travail réalisé contre la contrainte effective, W_n : $\Delta H^n = \Delta H_o + W_n$. Dans le sens positif, l'énergie d'activation s'écrit : $\Delta H^p = \Delta H_o - W_p$. Avec l'approximation $W_p = W_n = W$, et l'identification du travail appliqué :

$$W = \Delta H_o \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_o}}, \quad (15)$$

nous aboutissons aux fréquences de sauts dans le sens positif, h^p , et dans le sens négatif, h^n , suivantes :

$$h^p = \frac{v_D}{l_c} \frac{L}{l_c} \exp\left(-\frac{\Delta H_o}{kT}\right) \exp\left(+\frac{\Delta H_o}{kT} \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_o}}\right) \quad (16)$$

$$h^n = \frac{v_D}{l_c} \frac{L}{l_c} \exp\left(-\frac{\Delta H_o}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta H_o}{kT} \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_o}}\right) \quad (17)$$

La vitesse moyenne de la dislocation s'écrit : $v_{vis} = b(h^p - h^n)$, ce qui revient à adopter la loi de mobilité suivante :

$$v_{vis}(\tau^*, T) = v_D \frac{2b}{l_c^2} L \exp\left(-\frac{\Delta H_o}{kT}\right) \sinh\left(\frac{\Delta H_o}{kT} \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_o}}\right) \quad (18)$$

La vitesse de la dislocation vis est proportionnelle à sa longueur, augmente exponentiellement avec la température (à haute contrainte), mais s'annule lorsque la contrainte effective tend vers zéro. Cette équation ne comporte donc pas de dérive à haute température.

Remarque :

En toute rigueur, le terme pré-exponentiel dans l'équation (18) doit dépendre de plusieurs facteurs, comme les constantes intervenant dans la fréquence l'attaque ou l'exacte amplitude des sauts, ou encore la faible dépendance en contrainte de la longueur critique l_c , etc. Ces facteurs étant négligés dans ce travail, on considère donc que le facteur de proportionnalité est une constante, et par conséquent l'équation (18) peut être écrite sous la forme :

$$v_{vis}(\tau^*, T) = 2 H L \exp\left(-\frac{\Delta H_o}{kT}\right) \sinh\left(\frac{\Delta H_o}{kT} \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_o}}\right) \quad (19)$$

où H désigne une constante de dimension $[s^{-1}]$.

Comme nous pouvons le remarquer, afin d'utiliser cette équation finale, nous devons identifier la fréquence H . Or cette dernière est inaccessible par les mesures classiques (sauts de vitesse ou température). Nous adoptons alors la démarche suivante : les résultats qui ont servi à la détermination de l'énergie d'activation sont issus des testes de traction sur monocristaux de fer. Pour ces tests, la vitesse de déformation est fixée à $10^{-4} s^{-1}$ et la densité des dislocations mobiles à la fin de du stade 0 est estimée à $\rho_m = 10^{12} m^{-2}$. De la relation d'Orowan : $\dot{\gamma} = \rho_m b v$, la vitesse moyenne des dislocations, v , est estimée de l'ordre de $1 \mu m/s$. Ceci nous permet d'estimer la fréquence H proche de $1,5 \cdot 10^{11} s^{-1}$.

5.2- Dislocations non-vis

Suite à notre discussion dans le paragraphe 1.3, nous avons vu que beaucoup d'informations manquent pour l'établissement d'une loi de mobilité pour les dislocations non-vis. L'évolution de la vitesse en fonction de la température et de la contrainte reste mal connue. Toutefois, deux conclusions se sont dégagées de cette discussion : (i) les observations expérimentales et les simulations DM confirment que la mobilité des dislocations non-vis est largement plus élevée que celle des dislocations vis et (ii) la mobilité des dislocations non-vis peut également être activée thermiquement en raison de l'interaction avec les éléments en solution solide. Dans la mesure où ces dislocations ne contrôlent pas la contrainte d'écoulement, nous avons opté pour une solution simple et stable numériquement. Nous considérons que la vitesse d'un segment non-vis (v_{coin}) est égale à K fois la vitesse d'un segment vis de taille $1 \mu m$ et soumis à la même contrainte effective. Ceci s'écrit :

$$v_{coin}(\tau, T) = K(T) v_{vis}(L = 1 \mu m, \tau, T) \quad (20)$$

Le facteur de vitesse K est une fonction de la température. La loi de mobilité des dislocations non-vis s'écrit alors :

$$v_{coin}(\tau, T) = 2 K(T) v_o \exp\left(-\frac{\Delta H_o}{k_B T}\right) \sinh\left(\frac{\Delta H_o}{k_B T} \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_o}}\right) \quad (21)$$

où $v_o = 1,5 \cdot 10^{11} \mu m \cdot s^{-1}$. K doit avoir une valeur très grande aux basses températures pour reproduire l'anisotropie de mobilité observée et tendre vers 1 lorsque la température tend vers la température de transition T_a (300 K). Ceci est nécessaire pour retrouver l'isotropie de mobilité de toutes les dislocations dans le régime athermique.

Le problème qui reste à résoudre pour ce type de loi est de trouver la valeur du facteur K adaptée à chaque température. Dans le cas du zirconium, Monnet et *al.* [Monnet 2004] ont étudié l'influence de ce facteur sur les résultats des simulations DD. Leur résultat montre que ce facteur n'a pas d'effet sur la contrainte critique à partir du moment où il est considéré très grand à basse température. On donnera dans le chapitre III les valeurs de ce facteur, K , adoptées dans ce travail.

Conclusions

La soumission des dislocations vis à une forte friction du réseau conduit à de multiples conséquences sur la déformation plastique du fer à basse température : la déformation plastique est activée thermiquement, l'absence de contrainte critique associée au fonctionnement des sources de Frank-Read, les boucles de dislocations sont très allongées dans la direction du vecteur de Burgers, un stade 0 de déformation « visible ».

Compte tenu du fait que la mobilité des dislocations vis contrôle l'écoulement plastique, il est possible de déduire des résultats expérimentaux sur les monocristaux de fer l'énergie d'activation en fonction de la contrainte. Pour y arriver nous avons dû analyser différemment les courbes de traction reportées dans la littérature afin de prendre en compte la présence du stade 0. Nos résultats montrent que ni la contrainte critique ni l'énergie d'activation ne varient significativement avec le teneur en carbone. En accord avec la théorie, les résultats de nos ajustements révèlent une dépendance du travail appliqué en racine carré de la contrainte effective durant le processus d'activation thermique de la germination du double-décrochements. Afin d'éviter la dérive en vitesse à haute température, nous avons adopté une formulation en sinus hyperbolique à la place du facteur de Boltzmann dans l'équation d'Arrhenius.

Nous verrons, dans le chapitre prochain, comment nous pouvons introduire les lois de vitesse établies plus haut dans le code de simulations DD. L'aspect discret des boucles de dislocations nous impose un certain ensemble de restrictions à respecter afin de garantir la vitesse moyenne recherchée à l'échelle mésoscopique.

Références bibliographiques

- [Ackland 1997] – G. J. Ackland, D. J. Bacon, A. F. Calder, T. Harry, *Phil. Mag.*, A75, 713 (1997)
- [Ackland 2004] – G. J. Ackland, M. I. Mendeleev, D. J. Srolovitz, A. V. Barashev, *J. Phys. Condens. Mater.*, 16, S2629 (2004)
- [Boudet 1975] – A. Boudet, L. P. Kubin, *Le journal de physique*, 36, 823 (1975)
- [Brown 1962] – N. Brown, R. A. Ekvall, *Acta Metall.*, 10, 1101, (1962)
- [Bulatov 2006] – V. V. Bulatov, W. Cai, « Computer simulations of dislocations », Oxford series on materials modelling, ed : A. P. Sutton, R. E. Rudd (2006)
- [Cagnon 1971] – M. Cagnon, *Phil. Mag.*, 24, 1465 (1971)
- [Canrad 1960] – H. Conrad, H. Wiedersich, *Acta Metall.*, 8, 128 (1960)
- [Chaussidon 2006] – J. Chaussidon, M. Fivel, D. Rodney, *Acta Mater.*, 54, 3407 (2006)
- [Clouet 2008] – E. Clouet, S. Garruchet, H. Nguyen, M. Perez, C. S. Becquart (article soumis dans *Acta Mater.*)
- [Dever 1972] – D. J. Dever, *J. Appl. Phys.*, 43, 3293 (1972)
- [Domain 2005] – C. Domain, G. Monnet, *Phys. Rev. Lett.*, 95, 215506 (10) (2005)
- [Dorn 1964] – J. E. Dorn, S. Rajnak, *Trans. Metall. Soc. AIME*, 230, 1052 (1964)
- [Harry 2002] – T. Harry, D. J. Bacon, *Acta Mater.*, 50, 195 (2002)
- [Hirth 1982] – J. P. Hirth, J. Lothe, dans *Theory of dislocations*, Malabar Florida Krieger Publishing Company (1982)
- [Keh 1967] – A. S. Keh, Y. Nakada, *Can. J. Phys.* 45, 1101 (1967)
- [Keh 1968] – A. S. Keh, Y. Nakada, *Trans. JIM*, 9, 876 (1968)
- [Kocks 1975] – U. F. Kocks, A. S. Argon, M. F. Ashby, *Thermodynamics and kinetics of slip*, Vol. 19 de *Progress in Materials Science*, Pergamon press, Oxford (1975)
- [Kubin 1976] – L. P. Kubin. *The low temperature plastic deformation of bcc metals. Reviews on the Deformation Behavior of Materials I*, 243 (1976)
- [Kubin 1979a] – L. P. Kubin, F. Louchet, *Acta Metall.*, 27, 337 (1979)
- [Kubin 1979b] – L. P. Kubin, F. Louchet, *Acta Metall.*, 27, 343 (1979)
- [Kuramoto 1979] – E. Kuramoto, A. Aono, K. Kitajima, *Scripta Metall.*, 13, 1039 (1979)
- [Marian 2004] – J. Marian, W. Cai, V. V. Bulatov, *Nat. Mater.*, 3, 158 (2004)
- [Mendeleev 2003] – M. I. Mendeleev, S. W. Han, D. J. Srolovitz, G. J. Ackland, D. Y. Sun, M. Asta, *Phil. Mag.* 83, 3977 (2003)
- [Monnet 2004] – G. Monnet, B. Devincre, L. P. Kubin, *Acta Mater.*, 52, 4317 (2004)
- [Mott 1940] – N. F. Mott, F. R. N. Nabarro, *Proc. Phys. Soc.*, 52, 86 (1940)
- [Nabarro 2003] – F. R. N. Nabarro, *Phil. Mag.* 83, 3047 (2003)
- [Osetsky 2003] – Y. N. Osetsky, D. J. Bacon, *J. Nucl. Mater.*, 323, 268 (2003)
- [Quesnel 1975] – D. J. Quesnel, A. Sato, M. Meshii, *Mater. Sci. Eng.*, 18, 199 (1975)
- [Schoeck 1965] – G. Schoeck, *Phys. Stat. Sol.*, 8, 499 (1965)

- [Schoeck 1980] – G. Schoeck, Dans: F. R. N. Nabarro, Thermodynamics and thermal activation of dislocations. Dislocations in solids, Vol. 2., Amsterdam: North Holland, 67 (1980)
- [Seeger 1962] – A. Seeger, P. Schiller, Acta Metall., 10, 348 (1962)
- [Seeger 1984] – A. Seeger, Structure and diffusion of kinks in monoatomic crystals, Dans Dislocations 1984, ed. P. Veysseyre, L. Kubin, J. Castaing, Editions du CNRS, Paris, 141 (1984)
- [Simonelli 1993] – G. Simonelli, R. Pasianot, E. Savino, Mater. Res. Soc. Symp. Proc., 291, 567 (1993)
- [Solomon 1966] – H. D. Solomon, C. J. Mc Mahon, Jr., Work Hardening, Metallurgical Society Conference (Ed. Gordon and Breach), 309 (1966)
- [Solomon 1971] – H. D. Solomon, C. J. Mc Mahon, Jr., Acta Metall., 19, 291 (1971)
- [Smidt 1969] – F. A. Smidt, Acta Metall., 17, 381 (1969)
- [Spitzig 1970a] – W. A. Spitzig, A. S. Keh, Acta Metall., 18, 611 (1970)
- [Spitzig 1970b] – W. A. Spitzig, A. S. Keh, Acta Metall., 18, 1021 (1970)
- [Spitzig 1973] – W. A. Spitzig, Mater. Sci. Eng., 12, 191 (1973)
- [Takeuchi 1967] – S. Takeuchi, E. Furubayashi, T. Taoka, Acta Metall., 15, 1179 (1967)
- [Takeuchi 1972] – T. Takeuchi, J. Mano, Acta Metall., 20, 809 (1972)
- [Tang 1998] – M. Tang, L. Kubin, G. Canova, Acta Mater., 46, 3221 (1998)
- [Tapasa 2007a] – K. Tapasa, A. V. Bulatov, D. J. Bacon, Y. N. Osetsky, J. Nuc. Mater., 361, 52 (2007)
- [Tapasa 2007b] – K. Tapasa, A. V. Bulatov, D. J. Bacon, Y. N. Osetsky, Acta Mater., 55, 1 (2007)
- [Urabe 1975] – N. Urabe, J. Weertman, Mater. Sci. Eng., 18, 41 (1975)
- [Vitek 1970] – V. Vitek, R. C. Perrin, D. K. Bowen, Phil. Mag., 21, 1049 (1970)
- [Wen 2000] – M. Wen, A. H. Ngan, Acta Mater., 48, 4255 (2000)

Chapitre III

Simulation de la dynamique des dislocations

Table de matières

Introduction	58
1- A propos des simulations de dynamique des dislocations	58
2- A propos du code microMégas.....	60
2.1- Discrétisation des lignes de dislocations.....	61
2.2- Calcul des forces effectives sur les segments	62
2.3- Prise en compte des lois de mobilité du fer dans mM	63
2.4- Les règles locales	65
2.5- Les conditions aux limites	66
2.6- Configuration initiale des dislocations.....	68
3- Validation des lois de mobilité des dislocations.....	69
3.1- Conditions de simulation	69
3.2- Dépendance en température	70
3.3- Dépendance en vitesse de déformation.....	73
Conclusions	76
Références bibliographiques	77

Introduction

Dans ce chapitre, la méthode de simulations de dynamique des dislocations (DD) sera présentée. On s'intéressera plus particulièrement aux principes de fonctionnement du code microMégas (mM), utilisé dans ce travail de thèse. Les règles de discrétisation des lignes de dislocations adoptées pour la structure CC, les règles de calcul des forces sur les segments et la mise en œuvre des lois de mobilité présentées au chapitre précédant seront détaillées. On donnera aussi un aperçu des problèmes liés aux conditions aux limites utilisées. Ensuite, les résultats des premières simulations seront présentés. Ces simulations ont été réalisées pour valider les lois de mobilité des dislocations dans le cas du fer à basse température. Les deux principales caractéristiques de la déformation plastique dans ce régime thermiquement activé sont testées, c'est-à-dire, la dépendance de la contrainte critique en température et en vitesse de déformation.

1- A propos des simulations de dynamique des dislocations

Dans une approche multi-échelle de la plasticité des matériaux cristallins, les simulations de dynamique des dislocations (DD) sont le passage obligé pour relier les aspects atomiques aux aspects continus de la déformation plastique. A l'échelle atomique, les méthodes de simulation telles que les méthodes *ab initio* ou la dynamique moléculaire permettent d'étudier des aspects locaux tels que la structure du cœur des dislocations [Frederiksen 2003 – Cai 2004 – Domain 2005 – Chaussidon 2006] et l'interaction entre une dislocation et d'autres défauts cristallins, d'autres dislocations [Rodney 1999] ou des éléments d'impureté [Tapassa 2007 – Clouet 2008]. Ces simulations qui considèrent explicitement les interactions entre atomes dans un cristal, sont limitées par le nombre d'atomes pris en compte qui croît de manière cubique à 3D avec la taille du système étudié. Elles ne concernent donc que des petits éléments de volumes ($< 10^{-6} \mu\text{m}^3$) et ne peuvent simuler que de très brefs intervalles de temps, de l'ordre de 10^{-9} s. A l'échelle macroscopique, la déformation plastique est généralement traitée dans le cadre de la mécanique des milieux continus à travers des lois phénoménologiques.

Pour une meilleure prédiction du comportement mécanique des matériaux cristallins, un lien entre l'échelle atomique et l'échelle macroscopique est indispensable. Ceci implique le passage par une échelle intermédiaire qui est l'échelle mésoscopique. A cette échelle, les simulations DD sont dédiées à l'étude des mécanismes de la plasticité à travers le comportement collectif d'une large population de dislocations. En DD, la nature discrète du réseau atomique n'étant plus explicitement représentée, les volumes simulés peuvent atteindre des tailles supérieures à $10^3 \mu\text{m}^3$. Ces dimensions sont suffisantes pour être représentatives de

la déformation plastique à l'échelle mésoscopique et rendre compte de phénomènes complexes liés aux propriétés collectives des dislocations.

L'idée première des simulations de DD s'appuie sur la notion de discrétisation de l'espace et du temps. Pour connaître la force effective locale en n'importe quel point d'une dislocation, on va discrétiser (morceler) les lignes en un grand nombre de segments et calculer le champ de contraintes associé à chaque segment en fonction du problème aux limites étudié. Dans le cas d'un cristal de grandes dimensions, l'approximation d'un milieu infini va permettre de définir des solutions analytiques relativement simples [Brown 1964 – Foreman 1967 – De Wit 1967 – Devincre 1992]. A partir de là, si la loi de mobilité des dislocations est connue pour le matériau étudié, le déplacement des dislocations peut être prédit d'après le mouvement de chaque segment construisant chaque ligne de dislocations.

Les premiers codes de simulations DD décrivant les propriétés collectives des dislocations ont vu le jour à la fin des années 80 [Lépinoux 1987 – Ghoniem 1988]. Il s'agissait de simulations bidimensionnelles qui ont permis d'étudier la formation de microstructures au cours de la déformation plastique à travers une dynamique de lignes parallèles infinies en interaction dans un plan normal à la direction des dislocations. Cependant, ces codes de simulation simples sont limités par leur caractère bidimensionnel qui ne permet pas de rendre compte des propriétés importantes des dislocations telles que : les mécanismes de multiplication, les effets de tension de ligne ou encore la formation de jonctions. Ces dernières années, des travaux originaux ont été publiés pour améliorer le réalisme de telles simulations [Benzerga 2004 – Gomez-Garcia 2006]. Le premier code tridimensionnel de simulations DD a vu le jour au début des années 90 [Kubin 1992] et a montré que l'ensemble des limitations rencontrées lors des premières simulations disparaissent à 3D. A l'heure actuelle, plusieurs approches de simulations 3D existent [Devincre 1996a – Hirth 1996 – Fivel 1997 – Ghoniem 1997 – Schwartz 1997 – Zbib 2000 – Devincre 2001 – Weygand 2003 – Bulatov 2004]. Elles ont fait l'objet de nombreuses publications ; les forces et les faiblesses de chaque approche restent sujet à débat [Schwartz 1999 – Madec 2001a – Bulatov 2002]. Parallèlement, il faut noter que d'autres approches permettant d'étudier les propriétés des dislocations à l'échelle mésoscopique ont été développées ces dernières années [El-Azab 2000 – Wang 2001 – Xiang 2003]. Mais celles-ci restent encore bien en retrait par rapport aux simulations DD de la plasticité dont le nombre d'utilisateurs est toujours croissant.

Bien que les états de chargement étudiés avec la DD concernent à ce jour essentiellement les essais de déformation uniaxiale, les problèmes physiques abordés sont divers. Parmi les problèmes déjà traités, on peut citer par exemple :

- le durcissement par la forêt [Devincre 1994a – Madec 2002a – Queyreau 2008],
- la nanoindentation [Fivel 1998],
- les effets d'échelle ou de confinement [Schwarz 1996 – Lefebvre 2006],
- le durcissement par précipitation [Mohles 2001 – Monnet 2006 – Queyreau 2008],
- l'organisation des dislocations en microstructures [Madec 2002b],

- le comportement plastique dépendant de la température et de la vitesse de déformation [Tang 1998 – Monnet 2004],
- le chargement en fatigue [Shin 2005].

2- A propos du code microMégas

Le code de simulations microMégas (mM) utilisé dans ce travail a maintenant une longue histoire. Partant d'une approche de type automate cellulaire où les équations de la dynamique sont résolues sur un réseau de simulation homothétique du réseau cristallin [Kubin 1992] ; le modèle a beaucoup évolué durant ces dix dernières années. Les principales améliorations apportées au code concernent la discrétisation des lignes de dislocations et le traitement des conditions aux limites. Pour une présentation détaillée de ces aspects, le lecteur peut se référer aux mémoires de thèse de Madec [Madec 2001b] et de Groh [Groh 2003]. Ces dernières années, en fonction des matériaux simulés et des spécificités de chaque étude, mM a continué d'évoluer. Actuellement, mM permet l'étude de nombreuses symétries cristallines : CS, CFC [Madec 2002c – Devincré 2006], CC [Devincré 1996b – Madec 2004], HC [Monnet 2004] ou encore de l'olivine [Durinck 2007].

Enfin, une nouvelle voie de développement du code mM a été entreprise début 2000. Il s'agit de nouvelles simulations faisant la connexion entre les formalismes discrets et continus de la plasticité. Ces simulations utilisent un couplage entre mM et le code d'éléments finis ZeBuLon [Lemarchand 2001].

Les principes de bases de mM se décomposent en quatre étapes :

- la discrétisation des lignes de dislocations. Cette étape est très importante puisqu'elle doit satisfaire un compromis entre une bonne description de la courbure des dislocations et le temps de calcul. Le nombre de segments utilisés dans la simulation pour décrire une microstructure est le paramètre essentiel contrôlant la vitesse d'exécution des simulations. Le nombre optimum de segments à utiliser varie en général avec la structure du matériau simulé et les conditions de chargement ;
- la détermination des forces appliquées sur les segments. Ces forces sont calculées à partir de la théorie élastique des dislocations et doivent rendre compte de l'état du chargement associé aux conditions aux limites imposées ;
- la considération d'une ou de plusieurs lois de mobilité des dislocations qui, combinée au calcul des forces, permet de prédire le déplacement des segments durant un petit incrément de temps. Ces lois dépendent étroitement de la structure du cœur des dislocations et donc du caractère des dislocations ;
- le traitement des règles locales servant à modéliser des phénomènes locaux comme le glissement dévié, les interactions entre segments, etc.

2.1- Discrétisation des lignes de dislocations

Toutes les simulations DD sont fondées sur le principe de discrétisation des lignes de dislocations en segments pour former des « chaînes » représentatives de la courbure réelle des dislocations (figure (1-a)). Dans le code mM, les segments de discrétisation suivent des directions de vecteurs entiers appartenant à une base de vecteurs pré-tabulée (la base des vecteurs directeurs, BVD). Cette base dépend de la symétrie cristalline du matériau étudié. Du point de vue de la dynamique, il faut considérer le nombre de vecteurs défini dans la BVD comme le nombre de degrés de liberté autorisés aux dislocations lors des déplacements. Pour réduire le temps de calcul, la réduction du nombre de vecteurs utiles dans la BVD constitue l'un des objectifs du code mM. Dans une ancienne version du code, seules deux directions de vecteurs étaient considérées par système de glissement : un vecteur parallèle au vecteur de Burgers (vis) et l'autre dans la direction orthogonale (coin). Cette solution simple a depuis été abandonnée car elle pose des problèmes pour décrire les interactions entre dislocations. Dans la version actuelle de mM (version mixte), en plus des vecteurs vis et coin, deux directions supplémentaires ont été introduites pour une description optimisée et exacte des jonctions. Le lecteur peut se référer au mémoire de thèse de Madec [Madec 2001b] pour une comparaison détaillée des deux versions du code mM.

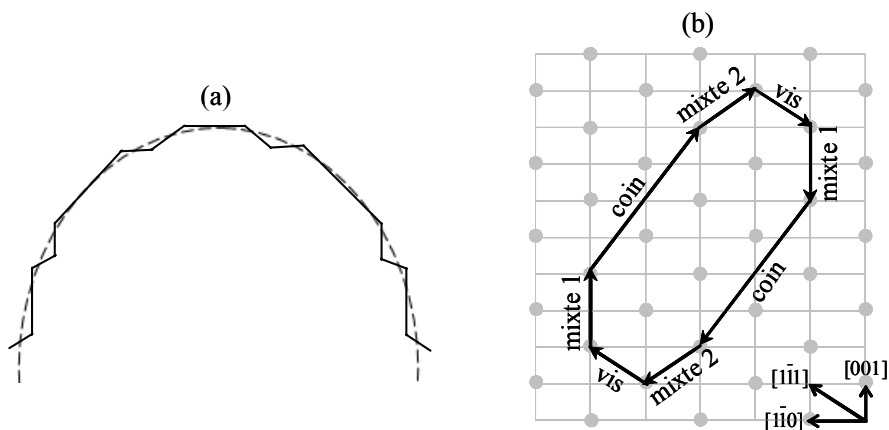


Figure 1 - (a) Exemple d'une ligne de dislocation discrétisée. (b) Base de vecteurs de discrétisation du système $[1\bar{1}1](110)$ dans un cristal CC.

Une BVD optimisée pour les matériaux de structure CC a été définie dans le code mM pour le besoin, à la fois, du travail de Queyreau [Queyreau 2008] et de ma thèse. La figure (1-b) présente la base de vecteurs de discrétisation dans le réseau de simulation pour le système de glissement $[1\bar{1}1](110)$. En plus des directions vis $[1\bar{1}1]$ et coin $[\bar{1}12]$, cette base contient les directions d'intersections entre dislocations $[001]$ appelée mixte 1 et $[1\bar{1}\bar{1}]$ appelée mixte 2. La troisième direction d'interaction possible est la direction vis. Dans la figure (1-b), les vecteurs de la BVD sont représentés en boucle pour rendre compte de la convention imposée pour signer le cisaillement plastique. En opposition avec toutes les BVD utilisées dans les études précédentes réalisées avec mM, cette base est asymétrique (les deux directions mixtes ne font pas le même angle avec la direction vis). De ce fait, plusieurs vérifications ont été

nécessaires pour s'assurer que cette asymétrie n'affecte pas la dynamique des dislocations [Queyreau 2008]. Un rapport interne eDF [Monnet 2005] décrit toutes les procédures d'introduction et de vérification relatives à la base de discrétisation de la structure CC. Les détails des vecteurs de la BVD utilisée dans ce travail sont présentés dans l'annexe B.

Les règles de connexion entre segments, les règles de gestion des déplacements des segments en fonction de leur voisinage, ainsi que d'autres règles topologiques de mM ne sont pas présentées dans ce mémoire. Le lecteur intéressé par ces aspects peut se référer au mémoire de thèse de Madec [Madec 2001b] et de Queyreau [Queyreau 2008] pour tous les détails utiles. Cependant, il semble important de rappeler que la discrétisation dans mM se fait à travers une longueur fixant le paramètre de maille du réseau de simulation. Cette longueur est telle que toutes les longueurs manipulées dans mM sont des vecteurs entiers. Le lien avec l'espace physique et le réseau de simulation est assuré à travers cette longueur et un facteur d'homothétie (échelle). Par définition, on suppose que les propriétés des dislocations peuvent être décrites par la seule théorie élastique lorsque l'on considère des propriétés des dislocations intervenant à une distance supérieure à l'« échelle ». Cette dernière quantité est généralement de l'ordre de quelques b .

2.2- Calcul des forces effectives sur les segments

Le déplacement d'un segment de dislocation est conditionné par la force effective à laquelle il est soumis. Cette force est calculée au centre de chaque segment et à chaque pas de la simulation. Le calcul de la force effective constitue l'étape du processus itératif la plus coûteuse en temps de calcul. Trois contributions définissent la force effective :

- la force due au chargement mécanique. Cette force dépend du problème aux limites étudié et peut devenir très complexe dans le cas d'un milieu borné. Pour la présente étude, on va faire l'hypothèse d'un petit élément de volume faisant partie d'un milieu infini et soumis à un chargement uniaxial parfait. Cela revient à imposer une contrainte appliquée homogène dans tout le volume simulé. De cette contrainte on va déduire une force appliquée avec la formule classique de Peach-Koehler [Peach 1950]. La variation de la force appliquée d'une itération à la suivante dépend du mode de chargement imposé (vitesse de déformation ou contrainte imposée, fatigue, relaxation, etc) ;
- la force due au champ de contraintes internes. Ce champ de contraintes est induit par les champs de déformation élastiques associés à tous les défauts cristallins présents dans le volume de simulation. Dans la plupart des calculs réalisés, le champ considéré résulte seulement de la microstructure des dislocations. Dans mM, le calcul du champ de contraintes associé aux segments de dislocations est réalisé à l'aide des formules de De Wit [De Wit 1967] modifiées par Devincre et Condat [Devincre 1992, 1995] pour être numériquement optimales. Dans le cadre de l'élasticité isotrope, ces formules permettent d'avoir les composantes du tenseur de contraintes associé à chaque

segment de dislocations en tout point de l'espace et ainsi de calculer les forces d'interactions entre segments. Ces forces sont en $(1/r)$ avec r la distance entre segments. Par souci d'optimisation, une méthode a été développée pour séparer les interactions à longue distance des interactions à moyenne et courte distances. Cette méthode est appelée la méthode de boîtes (ou multipôles) et est décrite dans le mémoire de thèse de Madec [Madec 2003]. Il faut juste noter ici qu'à courte distance, l'expression de la contrainte d'interaction diverge le long des lignes de dislocations. Pour cette raison, le calcul des forces d'interactions entre segments voisins le long d'une ligne de dislocation est remplacé par un calcul de tension de ligne locale ;

- la tension de ligne est une approximation classique de la théorie des dislocations basée sur un calcul du gradient de l'énergie de ligne en fonction de la courbure locale des dislocations. Trois définitions de la tension de ligne locale sont introduites dans mM [De Wit 1959 – Foreman 1967 – Mohles 2001]. Les différences entre ces formules viennent principalement des différents choix de simplifications faites sur les rayons de coupure bornant le calcul de l'énergie élastique. Dans ce travail, on a choisit de travailler avec la formulation de Mohles qui s'écrit sous la forme :

$$T_L = \frac{\mu b^2}{4\pi} \left(\frac{1+\nu - 3\nu \sin^2 \theta}{1-\nu} \right) \ln \left(\frac{2\Lambda}{r_0} \right), \quad (1)$$

avec ν le coefficient de Poisson, θ l'angle entre la direction de ligne et le vecteur de Burgers, $2\Lambda = R\theta$ (où R est le rayon de courbure locale de la ligne) et $r_0 = b$. Le calcul du rayon de courbure locale R dépend du problème traité. Dans certains cas, le calcul faisant intervenir le cercle passant par les centres des premiers voisins s'avère suffisant, tandis que dans d'autres cas, il est nécessaire considérer plus de voisins de part et d'autre du segment [Schwarz 1999]. Queyreau [Queyreau 2008] a étudié ce problème durant sa thèse et suggère l'utilisation dans le code mM d'une distance minimale entre les trois points intervenant dans le calcul de R . Cette distance dépend en pratique de la longueur de discrétisation et a été fixée à 0,1 pour les calculs dans ce travail.

La contrainte effective sur les segments est finalement la somme de ces trois termes. C'est cette contrainte qui sert à déplacer les segments et qui intervient dans la loi de mobilité des dislocations.

2.3- Prise en compte des lois de mobilité du fer dans mM

Dans le régime thermique, une distinction est faite entre la mobilité des dislocations vis et celle des dislocations non-vis. Les expressions des lois de mobilité ont été établies dans le deuxième chapitre. La loi de mobilité des dislocations vis dépend non seulement de la contrainte effective mais aussi de la température et de la longueur de la ligne dans la direction vis (équation (18) du chapitre II). A une température donnée, la discrétisation des lignes de

dislocations nous impose un traitement particulier dans mM pour intégrer correctement la mobilité des dislocations vis. En effet, une section de dislocation vis est souvent construite à partir de plusieurs segments vis alignés. Or chaque segment composant a sa propre longueur et est soumis à une contrainte effective différente de ses voisins.

La procédure que nous avons programmée dans mM consiste tout d'abord à identifier le caractère de tous les segments voisins d'un segment vis. Cette étape permet de cerner le nombre et la longueur des segments appartenant à la même section de dislocation vis. La figure (2) schématise ce traitement pour un segment i avec n voisins j dans un même alignement vis.

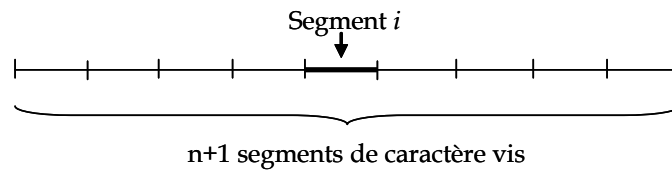


Figure 2 - Schématisation d'une ligne de dislocation de caractère vis discrétisée en plusieurs segments.

À une température donnée T , si le segment i était isolé, sa vitesse v_i dépendrait uniquement de sa longueur l_i et de la contrainte effective τ_i à laquelle il est soumis. L'expression de v_i est alors simplement :

$$v_i = 2 H l_i \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right) \sinh\left(\frac{\Delta H_0}{kT} \sqrt{\frac{\tau_i}{\tau_0}}\right) \quad (2)$$

Mais, dans le cas du schéma de la figure (2), le segment i n'est qu'une sous section de la dislocation vis. La vitesse du segment i dépend de la vitesse de chaque segment de la ligne vis. De ce fait, la vitesse effective du segment i , v_{ieff} , en présence de ses j voisins (j varie de 1 à n) doit être la somme de la vitesse du segment i s'il était isolé et de la contribution des vitesses v_j de tous les segments j . Si on suppose que tous les segments de la dislocation ont la même longueur et sont soumis à la même contrainte effective, la vitesse effective v_{ieff} du segment i sera :

$$v_{ieff} = v_i + \sum_{j=1}^n v_j = (n+1) v_i \quad (3)$$

Cependant, ce cas simple qui équivaut au calcul de la longueur totale de la ligne dans la direction vis est très idéalisé, car la contrainte effective varie le long d'une ligne. C'est pourquoi le calcul de la vitesse effective de i , v_{ieff} doit rendre compte à la fois de la variation de la longueur des segments et des fluctuations de la contrainte effective au centre de chaque segment. Dans ce travail, on a adopté un traitement simplifié qui donne une bonne approximation de v_{ieff} . Ce traitement peut être compris comme suit : d'abord, la vitesse v_i fonction de la longueur et de la contrainte sur chaque segment i est identifiée. Puis lorsque toutes les vitesses v_i sont calculées, on ajoute à chacune une contribution moyenne associée à

l'ensemble des segments de la section vis. Cette contribution additionnelle est définie comme la somme des vitesses de chaque segment, pondérée par le facteur $n/(n+1)$. Ainsi, la vitesse effective v_{ieff} du segment i s'exprime comme suit:

$$v_{ieff} = v_i + \frac{n}{n+1} \left(v_i + \sum_{j=1}^n v_j \right) \quad (4)$$

On vérifie aisément qu'une telle formule phénoménologique vérifie de nombreuses propriétés physiques attendues. Par exemple, dans le cas d'une distribution de segments soumis à un chargement homogène, l'équation (4) est équivalente au résultat théorique exact, c'est à dire à l'équation (3).

Pour la vitesse des dislocations non-vis, l'expression définie au chapitre II ne dépend pas de la longueur de la ligne (équation (21) du chapitre II). Le problème lié à la discrétisation ne se pose donc pas. A une température donnée, chaque segment de caractère non-vis se déplace sous l'effet unique de la contrainte effective calculée en son centre. Il faut cependant tenir compte du facteur K défini au chapitre précédant et qui traduit le rapport de vitesses entre dislocations vis et dislocations non-vis. Ce facteur varie rapidement avec la température et sa valeur est une donnée d'entrée des simulations. Nous reviendrons sur ce paramètre lors des tests de validation des lois de mobilité des dislocations.

2.4- Les règles locales

Dans le but de rendre compte des propriétés de contact ou des propriétés liées à la structure du cœur des dislocations, des règles locales sont définies dans mM. Ces règles concernent les mécanismes de formation et de destruction des jonctions, les mécanismes relatifs au glissement dévié des dislocations vis et les propriétés des dislocations associées aux interactions entre dislocations et particules. Par convention, ces règles locales sont testées sur chaque segment et à chaque pas de la simulation. Elles sont calibrées sur des résultats expérimentaux ou les résultats des simulations effectuées à l'échelle atomique. Le lecteur peut se référer aux travaux de Devincré et Kubin [Devincré 1994b], Monnet [Monnet 2006] et Queyreau [Queyreau 2008] pour une description détaillée des règles locales programmées dans mM.

Je dois cependant signaler, que durant les premiers mois de la thèse, j'ai travaillé sur une partie des règles locales programmées dans mM à travers la réécriture d'une partie du code dédiée à la formation des jonctions. L'ensemble des règles locales définies dans cette partie ont un caractère essentiellement topologique. Il s'agit de définir, lorsque deux segments arrivent en contact, tous les cas possibles devant conduire à la formation d'une jonction. Ensuite, suivant les cas de figure, on oriente l'exécution du programme vers différentes solutions de discrétisation des lignes de dislocations. Ce travail de programmation était important car il m'a donné l'occasion de mieux connaître le code mM et ainsi durant ma thèse

à ne pas utiliser la simulation DD comme une « boîte noire ». Un résumé de mon travail de programmation réalisé dans mM est présenté en annexe C.

2.5- Les conditions aux limites

L'utilisation de surfaces libres en DD [Devincre 1994a] induit la présence de forces images modifiant sensiblement les propriétés dynamiques des dislocations près des surfaces. De telles conditions aux limites sur un volume simulé micrométrique réduit donc sensiblement le domaine simulé pouvant être assimilé à un volume représentatif des conditions de déformation macroscopiques. Afin de résoudre ce problème, des conditions aux limites périodiques (CLP) ont été mises en place dans mM. Une discussion générale sur les forces et faiblesses des CLP a été faite en premier, par Bulatov et *al.* [Bulatov 2001]. Plus généralement, les simulations de Gomez-Garcia et *al.* [Gómez-García 2000] illustre simplement les avantages des CLP par rapport aux conditions de bords libres dès lors que l'on simule des propriétés collectives des dislocations.

Les CLP permettent de travailler avec un volume simulé plongé dans un milieu élastique infini et représentatif d'un monocristal ou d'un grain de grande dimension. Ceci a pour avantage immédiat de simplifier la comparaison entre simulation et expérience. Avec ces conditions, le volume simulé est entouré par de volumes images. Chaque perte du segment d'un côté du volume simulé est remplacée par une image qui entre du côté opposé. De cette façon, le flux de dislocations sortant est équilibré par un flux de dislocations entrant. De même, la continuité des lignes de dislocations et l'équilibre des contraintes internes sont vérifiés au bord du volume simulé. Il faut signaler, cependant, qu'avec des CLP des précautions sont nécessaires pour éliminer des artefacts importants [Madec 2003].

Dans mM, l'introduction des CLP avec une structure CC occasionne un problème dans le cas où le volume de simulation est de forme cubique. En effet, une auto-annihilation de la dislocation se produit après le premier renvoi. Les plans de glissement $\{110\}$ sont orthogonaux aux faces $\{100\}$ du volume simulé. Les segments qui quittent le volume de simulation sont directement réintroduits dans le plan d'origine. Une solution simple a été proposée pour résoudre ce problème. Elle consiste à considérer un volume de simulation de forme orthorhombique. On retarde ainsi l'auto-annihilation des dislocations à des déformations importantes.

La forme et les dimensions de la boîte de simulation doivent être bien définies avant chaque calcul et le simple choix d'une forme orthorhombique ne suffit pas dans certains cas. C'est pourquoi d'autres solutions ont été proposées par Madec et *al.* [Madec 2003]. Une première solution consiste à effectuer une rotation du volume simulé vis-à-vis des axes du cristal simulé. L'autre solution consiste à appliquer des translations sur les volumes images par rapport au volume de référence. Cette dernière solution est en pratique difficile à mettre en œuvre et c'est la solution d'une rotation de la boîte de simulation qui est généralement préférée [Madec 2003 – Monnet 2004 – Queyreau 2008].

Dans le cas du code mM, appliquer une rotation au volume simulé équivaut à appliquer une rotation à la BVD. Pour la présente étude, nous avons vérifié qu'une rotation autour d'un axe $\langle 111 \rangle$ d'un angle de 60° (pour que le déterminant de la matrice de rotation ne soit pas trop grand) donne de bons résultats. L'une des huit matrices équivalentes à cette rotation est :

$$\underline{\underline{M}} = 3 \begin{bmatrix} 2/3 & \bar{1}/3 & 2/3 \\ 2/3 & 2/3 & \bar{1}/3 \\ \bar{1}/3 & 2/3 & 2/3 \end{bmatrix} \quad (5)$$

On notera que dans cette matrice un facteur multiplicatif de valeur 3 a été pris en compte pour retrouver des vecteurs entiers dans la BVD de mM. Cependant, suivant les conditions de chargement imposées, une seule rotation peut être insuffisante. En fait, après une rotation axiale simple, 3 des 6 plans $\{110\}$ sont toujours perpendiculaires à une face du volume de simulation. C'est pourquoi une solution combinant deux rotations est parfois nécessaire. Dans notre étude, suivant le type de simulations envisagées, une matrice de rotation a été systématiquement choisie de sorte que tous les systèmes de glissement actifs ne soient pas pénalisés par les artefacts des CLP.

Par ailleurs, dans le cas de la déformation plastique à basse température des matériaux CC, une analyse supplémentaire est nécessaire concernant la forme de la boîte de simulation utilisée. En effet, à cause de la faible mobilité des dislocations vis, les boucles de dislocations sont très anisotropes. Celles-ci s'allongent fortement dans la direction du vecteur de Burgers. Cette anisotropie de déplacement impose que l'on prenne en compte le caractère des dislocations lors du calcul de la distance d'auto-annihilation induite par les CLP. Plus précisément, la distance d'auto-annihilation doit être déterminée dans une seule direction de glissement. Monnet et *al.* [Monnet 2004] ont proposé une méthode simple pour calculer cette distance. Leur méthode de calcul a été adoptée dans notre étude et est rappelée ci-après.

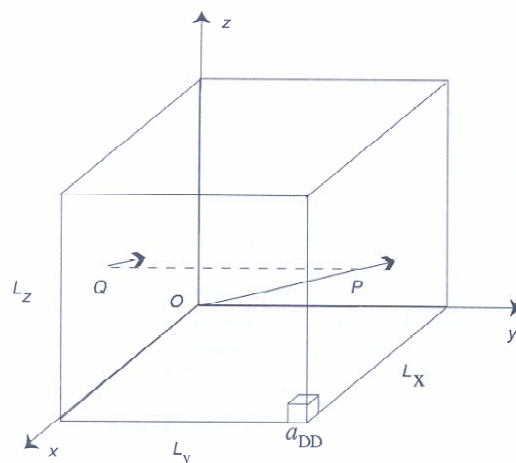


Figure 3 - Un segment coin se déplaçant le long de OP , croise la limite du volume simulé en P , son image est introduite en Q , tel que $PQ = -L_y$. Les dimensions du volume simulé sont L_x , L_y et L_z . a_{DD} est le paramètre de réseau de simulation.

Il s'agit de considérer un volume de simulation de forme orthorhombique dont les dimensions sont (L_x, L_y, L_z) . Ces dimensions sont des entiers multiples du paramètre du réseau de simulation a_{DD} : $L_x = N_x a_{DD}$, $L_y = N_y a_{DD}$ et $L_z = N_z a_{DD}$. Le vecteur déplacement unitaire des segments coin est $\vec{d} = (d_x, d_y, d_z)$ et le parcours de glissement correspondant est représenté par le vecteur $\vec{OP} = l \vec{d}$ (figure (3)). Si on suppose qu'après un nombre (u, v, w) de renvois, le segment revient à sa position initiale ou à la position de l'une de ses images, la condition d'auto-annihilation s'écrit :

$$\begin{cases} l d_x - u N_x = 0 \\ l d_y - v N_y = 0 \\ l d_z - w N_z = 0 \end{cases} \quad (6)$$

En éliminant l des équations (6), on obtient deux relations indépendantes :

$$\begin{cases} u = \frac{N_y d_x}{N_x d_y} v \\ v = \frac{N_z d_y}{N_y d_z} w \end{cases} \quad (7)$$

Ces deux équations (7) ont un nombre infini de solutions entières (u, v, w) . Cependant, c'est la première auto-annihilation qui a un sens physique. Celle-ci correspond aux plus petites valeurs entières (u_0, v_0, w_0) telles que:

$$\lambda = \sqrt{(u_0 L_x)^2 + (v_0 L_y)^2 + (w_0 L_z)^2} \quad (8)$$

Après calcul de λ (la distance d'auto-annihilation), les dimensions du volume de simulation peuvent être ajustées en vue d'avoir une distance d'auto-annihilation adaptée à chaque problème simulé. Pour les simulations effectuées dans ce travail, on s'attachera de donner les dimensions de la boîte de simulation ainsi que les distances d'auto-annihilation. Les distances λ ont été systématiquement validées par la simulation du fonctionnement d'une source de Frank-Read.

Enfin, il faut noter que dans le cas où les boucles de dislocations deviennent isotropes (aux plus grandes températures), une autre méthode développée par Madec et *al.* [Madec 2003] doit être utilisée. Cette méthode permet la détermination d'une distance moyenne d'auto-annihilation isotrope. Cette solution est détaillée dans la thèse de Queyreau [Queyreau 2008].

2.6- Configuration initiale des dislocations

Pour compléter cette description du code mM, il semble utile de décrire brièvement les options disponibles pour fabriquer les configurations initiales des lignes de dislocations. En

bref, les microstructures initiales de dislocations sont le résultat d'un tirage aléatoire, pondéré par système de glissement, d'objets élémentaires tels que :

- des sources de Frank-Read ;
- des boucles dipolaires formées de quatre segments de caractère coin : deux segments appartenant à un système donné et deux autres appartenant à l'un de ses systèmes conjugués, possibles par glissement dévié ;
- des boucles glissiles constituées de quatre segments appartenant au même système : deux segments vis et deux segments coin.

Le choix de tel ou tel élément pour construire une configuration initiale dépend du problème à traiter. Pour nos simulations, les éléments considérés ont presque toujours été des boucles dipolaires. Ce choix a deux justifications : d'une part, on désire éliminer tout point d'ancrage artificiel dans les simulations, et d'autre part, on ne veut considérer à l'état initial que des segments de caractère coin. Dès les premiers instants de simulation, ces segments vont se déplacer créant ainsi une microstructure faite principalement de lignes vis. En d'autres termes, la présence de segments vis à l'état initial n'a pas d'intérêt dans la mesure où ces segments seront formés au cours du stade 0 (*cf.* chapitre II).

3- Validation des lois de mobilité des dislocations

L'évolution de la contrainte critique avec la température est l'une des caractéristiques les plus importantes du fer à basse température. C'est cette dépendance mesurée expérimentalement qui nous a servi au chapitre II pour établir la loi de mobilité des dislocations vis dans le fer. Les premières simulations que nous avons réalisées avaient donc pour objectif de : (i) valider les principales hypothèses faites pour établir les lois de mobilité et (ii) vérifier que l'implémentation de ces lois a été faite correctement dans mM. Pour ce faire, nous avons essayé de reproduire avec la simulation, la dépendance en température de la contrainte critique du fer. Ces simulations ont été réalisées dans des conditions similaires aux expériences utilisées pour calculer les différents paramètres des lois de mobilité (ΔH_0 , v_0 , τ_0 , K). On réalise donc des essais de traction en glissement simple et avec une densité initiale de dislocations assez faible.

3.1- Conditions des simulations

La configuration initiale utilisée pour ces premières simulations est faite à partir d'une distribution aléatoire de boucles dipolaires coins distribués également sur les 12 systèmes de glissement $\langle 111 \rangle \{110\}$. L'axe de traction choisi est tel que seul le système $\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle (110)$ est actif. Le facteur de Schmid sur ce système est maximum et est égal à 0,5. Les autres systèmes de glissement sont inactifs et forment une forêt obstacle pour le déplacement du système primaire. La densité de cette forêt est égale à $1,5 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$. La présence de la forêt est justifiée

dans nos simulations puisque l'on veut vérifier l'hypothèse faite au chapitre II que le durcissement de la forêt est négligeable en fin de stade 0 et que la contrainte d'écoulement à basse température est uniquement contrôlée par la mobilité des dislocations vis.

Afin de s'affranchir du problème de stade 0, une pré-déformation avec une vitesse de déformation de 10^{-4} s^{-1} est d'abord imposée sur la distribution initiale de boucles. Ainsi, on obtient la microstructure du système primaire considérée pour chaque température à tester. A basse température, la densité du système primaire après pré-déformation est constituée presque uniquement de longues dislocations vis, tandis qu'à plus forte température, la densité des dislocations coin du système primaire tend à s'approcher de la densité des dislocations vis. Dans tous les cas, la densité primaire en début de simulation est d'environ 5.10^{11} m^{-2} .

Une boîte de simulation orthorhombique avec des CLP est utilisée. Les dimensions de ce volume élémentaire sont $10 \times 6 \times 6 \text{ }\mu\text{m}^3$. Combinée avec la matrice de rotation décrite plutôt (équation (5)), cette solution aux limites est telle qu'un libre parcours avant auto-annihilation des dislocations coins de $33 \text{ }\mu\text{m}$ est imposé à basse température (dans le régime fortement anisotrope). La vitesse de déformation simulée est identique à l'expérience et est égale à 10^{-4} s^{-1} (*cf.* chapitre II).

Afin d'étudier l'effet de la température, cinq températures sont simulées: 50, 100, 150, 200 et 250 K. Pour ces températures, les valeurs du facteur K considérées pour la mobilité des dislocations coins sont présentées dans le tableau (1). Ces valeurs, qui seront utilisées tout au long de notre étude, ne peuvent être complètement justifiées par des arguments physiques (*cf.* chapitre II). Elles sont en réalité le résultat d'un ajustement empirique fait à plusieurs reprises durant ma thèse pour minimiser le temps de calcul, mais aussi satisfaire la condition importante que la vitesse du déplacement des dislocations non-vis est, quelque soit la température, significativement plus grande que celle des dislocations vis.

T (K)	K
50	1000000
100	10000
150	1000
200	200
250	50

Tableau 1 - Valeurs du facteur de vitesses entre dislocations vis et dislocations coin, K , pour les cinq températures simulées.

3.2- Dépendance en température

On a vu dans le premier chapitre que la dépendance en température du comportement plastique du fer se traduit immédiatement par l'augmentation de la contrainte critique lorsque l'on diminue la température. Comme le montrent les courbes contrainte-déformation de la

figure (4-a), cette propriété basique est bien reproduite par les simulations à toutes les températures.

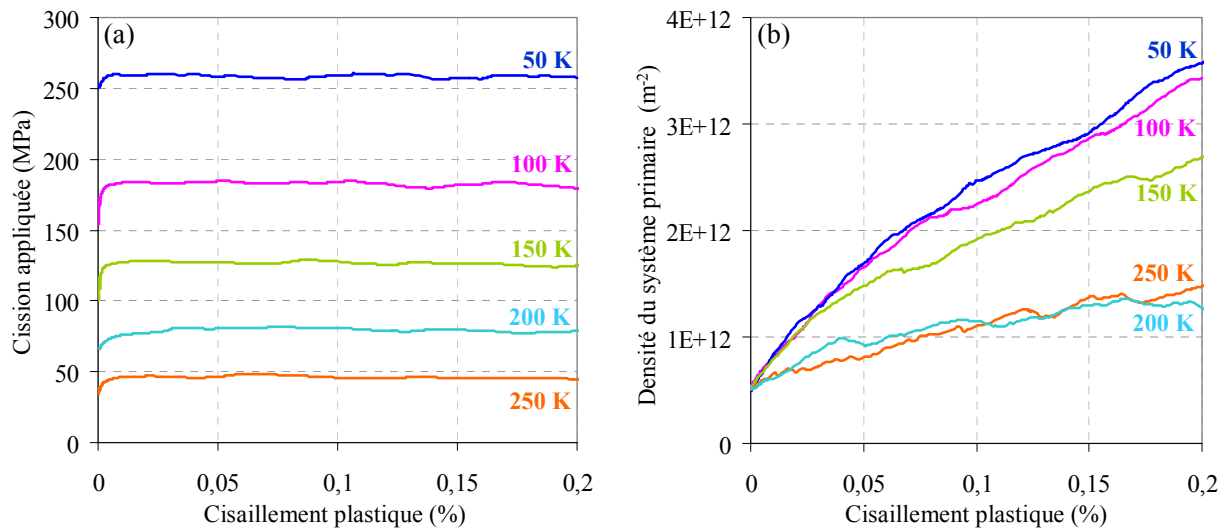


Figure 4 - (a) Courbes de traction simulées. (b) Evolution de la densité du système primaire au cours de la déformation. L'intervalle de température considéré est 50-250 K. La vitesse de déformation imposée est 10^{-4} s^{-1} .

De plus, comme le montre la figure (4-b) le taux de multiplication du système primaire en début de déformation augmente lorsque l'on abaisse la température. Dans l'intervalle de températures considéré, on peut distinguer deux cas limites. A 50 K, le déplacement de petites sections de ligne non-vis génère en fin de stade 0 de très longues dislocations vis dont la mobilité est très réduite. La déformation plastique générée par ces segments non-vis lors de la traversée de la forêt est la source d'une multiplication importante des dislocations vis. Inversement, à 250 K, la différence de mobilité entre dislocations vis et dislocations non-vis est plus faible, le mouvement des lignes de dislocation au travers de la forêt est plus isotrope et conduit à un taux de multiplication comparable à ceux rencontrés dans les matériaux CFC. On notera cependant qu'en fin de simulation (0,2%) que les taux de multiplication deviennent quasi indépendants de la température. On montre ainsi que l'on est bien en fin du stade 0.

L'évolution en fonction de la température de la microstructure des dislocations simulée est illustrée sur la figure (5). On vérifie qu'à 50 K, la microstructure est principalement formée de dislocations vis. Ces dislocations sont rectilignes et droites du fait de leur faible mobilité. A l'inverse, à 250 K, les dislocations observées sont courbées et plus fortement ancrées par la forêt. Nous reviendrons sur ce résultat dans le chapitre dédié au durcissement de la forêt.

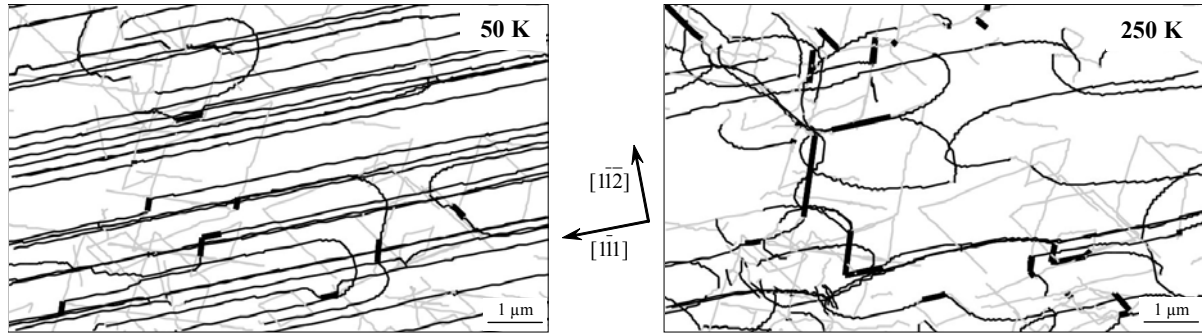


Figure 5 - Microstructures des dislocations simulées après 0,1% de déformation plastique. Lames d'épaisseur 2 μm . Le plan d'observation est le plan de glissement du système primaire (en noir). La forêt est présentée en gris. Les jonctions entre système primaire et la forêt sont en gras. Deux températures sont considérées, 50 et 250 K. La vitesse de déformation imposée est 10^{-4} s^{-1} .

Finalement, on a rassemblé sur la figure (6), les valeurs de la contrainte critique simulée en fonction de la température pour une comparaison directe avec l'expérience. Les valeurs de la contrainte critique simulées sont relevées en fin de courbes de traction (figure (4-a)). On voit que nos simulations reproduisent très précisément l'évolution de la contrainte critique en fonction de la température. Les hypothèses simplificatrices faites au chapitre II pour établir les lois de mobilité des dislocations dans le fer sont donc à posteriori vérifiées. De même, démonstration est faite que ces lois ont été correctement implémentées dans le code de simulation mM.

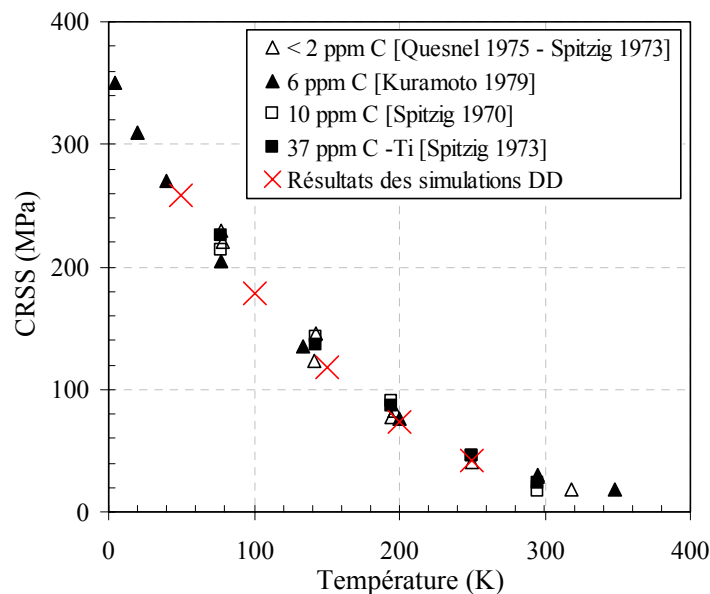


Figure 6 - Variation de la contrainte critique avec la température. Les résultats de simulations DD sont comparés aux données expérimentales obtenues pour le fer. La vitesse de déformation imposée est 10^{-4} s^{-1} .

3.3- Dépendance en vitesse de déformation

L'effet de la vitesse de déformation a également été étudié sur ces premières simulations. Comme nous l'avons vu au premier chapitre, cet effet se manifeste par une augmentation de la contrainte critique quand la vitesse de déformation augmente. Expérimentalement, cet effet est important car il permet de caractériser la réponse mécanique du matériau à travers le paramètre physique, le volume d'activation. Cette quantité peut être déterminée à partir d'un essai de saut de vitesse à travers l'expression (2) du premier chapitre.

Le volume d'activation est relié à l'aire balayée durant l'événement de l'activation thermique. En fonction de l'énergie d'activation ΔH , il s'écrit par définition :

$$V = - \left(\frac{\partial \Delta H}{\partial \tau} \right)_T \quad (9)$$

En suivant toujours le même protocole de simulation, nous avons effectué des tests de traction à deux vitesses de déformation différentes (10^{-3} et 10^{-4} s^{-1}) et pour cinq températures. Les courbes de traction simulées à la vitesse de déformation de 10^{-3} s^{-1} ne sont pas reproduites ici dans la mesure où elles sont, mis à part le niveau de la contrainte critique, similaires à celles de la figure (4-a). Avec les mesures de la contrainte simulée, un volume d'activation est calculé pour chaque température. Ces valeurs obtenues sont comparées aux valeurs expérimentales sur la figure (7-a). Toutes ces mesures ont été calculées avec l'aide de l'équation (9). Les valeurs expérimentales ont été déterminées à travers les courbes de la littérature donnant le volume d'activation en fonction de la contrainte effective. En fait, on a relevé, pour la contrainte effective correspondant à chacune des températures de simulation considérées, la valeur du volume d'activation correspondant. De cette façon, on s'est affranchi du problème lié à la manière de relever la contrainte critique expérimentale. Ce problème a été discuté dans le chapitre II.

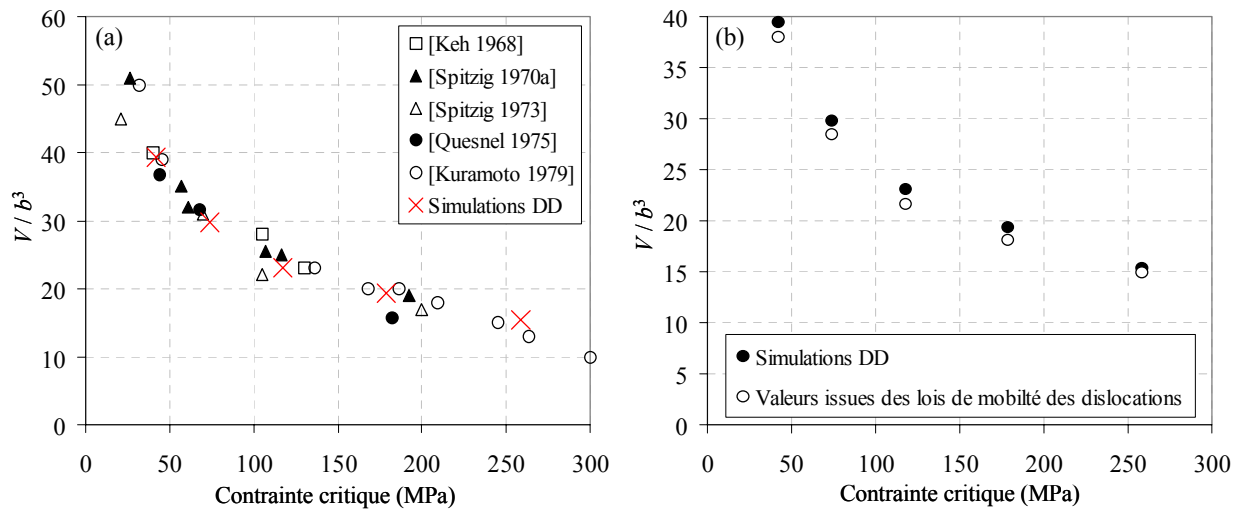


Figure 7 - Volume d'activation en fonction de la température. (a) Comparaison entre les résultats de simulation DD et les données expérimentales. (b) Comparaison entre les résultats de simulations et les valeurs calculées à l'aide des lois de mobilité des dislocations.

Dans tout le domaine de température étudié, les volumes d'activation déduits des simulations sont en bon accord avec les mesures expérimentales (figure (7-a)). On montre ainsi, que même si les détails du mécanisme atomique du double-décrochements ne sont pas pris en compte explicitement dans les simulations, les lois de mobilité mésoscopiques incluses dans mM sont à même de reproduire les propriétés essentielles du glissement des dislocations dans le fer.

Afin de pousser plus loin cette analyse, nous avons également comparé les valeurs de V obtenues par DD avec les valeurs théoriques calculées d'après l'équation (10). Une telle analyse consiste à dériver l'équation établie au chapitre II donnant la dépendance en contrainte de l'énergie d'activation :

$$\Delta H = \Delta H_0 \left(1 - \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_0}} \right) \quad (10)$$

A une température donnée, l'expression du volume d'activation doit satisfaire l'équation :

$$V = \frac{\Delta H_0}{2\tau_0 \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_0}}}, \quad (11)$$

avec $\Delta H_0 = 0,84$ eV, $\tau_0 = 363$ MPa et τ^* la contrainte effective obtenue à travers les courbes de traction de la figure (4-a).

La comparaison entre les valeurs issues de ce calcul théorique simple et les valeurs issues des simulations est présentée sur la figure (7-b). Une fois de plus, un bon accord est constaté entre les deux types de calculs.

En résumé, les résultats des figures (7-a) et (7-b) permettent de vérifier que nos simulations reproduisent exactement l'effet de la vitesse de déformation sur le comportement plastique du fer.

Conclusions

Le code de dynamique des dislocations microMégas (mM) repose sur les concepts usuels en mécanique classique de discrétisation de l'espace et du temps. Dans mM, la dynamique est résolue sur un réseau de simulation défini par une base de vecteurs contrôlant la discrétisation des lignes de dislocations. Cette base de vecteurs (BVD) contient huit vecteurs par système de glissement : deux vecteurs vis, deux vecteurs coin et quatre vecteurs mixte parallèles aux directions d'interactions entre systèmes de glissement. La force effective contrôlant le déplacement des dislocations est calculée au centre de chaque segment discrétisant les lignes. Cette force est la somme de trois termes : la force appliquée, la force interne qui tient compte des interactions entre toutes les dislocations présentes dans la microstructure et un terme de la tension de ligne locale. Les incréments de déplacement des segments sont calculés à partir des lois de vitesse fonction du caractère des lignes et du pas du temps élémentaire imposé.

La loi de mobilité des dislocations vis dépend non seulement de la contrainte effective, mais aussi de la température et de la longueur. Un traitement particulier est programmé dans mM pour sélectionner tous les segments vis alignés dans une même direction afin de rendre compte correctement de l'effet de longueur. La loi de mobilité des segments non-vis dépend seulement de la contrainte effective et de la température. Sa formulation fait cependant appel au facteur empirique K fonction de la température et dont l'amplitude a été établie lors de nos premières simulations. Cet ajustement permet de vérifier qu'aux plus basses températures, la contrainte critique de déformation plastique en fin de stade 0 est contrôlée par le glissement des dislocations vis ainsi que de reproduire des microstructures de dislocation réalistes quelque soit la température. Des conditions aux limites périodiques sont utilisées dans nos simulations pour minimiser la taille des volumes simulés. Pour éviter de possibles artefacts associés à ces conditions aux limites, la taille et la forme du volume simulé sont déterminées à partir d'un calcul de la distance d'auto-annihilation des dislocations coin.

Nos premières simulations ont été consacrées à la validation des lois de mobilité des dislocations déterminées au chapitre II. En imposant des conditions de simulations similaires aux conditions expérimentales, on a pu reproduire à la fois la dépendance de la contrainte critique en température et en vitesse de déformation. Ce résultat montre que l'analyse des propriétés thermiquement activées faite au chapitre II, ainsi que leur adaptation dans notre code de simulation sont correctes. Il est donc raisonnable de penser que les simulations DD que nous allons mettre en œuvre dans les deux chapitres suivants vont modéliser correctement le comportement plastique du fer déformé à basse température.

Références bibliographiques

- [Benzerga 2004] – A. Benzerga, Y. Brechet, A. Needleman, E. Van der Giessen, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 12, 159 (2004)
- [Brown 1967] – L. Brown, *Phil. Mag.*, 10, 441 (1964)
- [Brunner 1997] – D. Brunner, J. Diehl, *Phys. Stat. Sol.* 160, 355 (1997)
- [Bulatov 2001] – V. V. Bulatov, M. Rhee, W. Cai, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 653, Z1.3.1 (2001)
- [Bulatov 2002] – V. V. Bulatov, *J. Computer-Aided Materials Design*, 9, 133 (2002)
- [Bulatov 2004] – V. V. Bulatov, W. Cai, J. Fier, M. Hiratani, T. Pierce, M. Tang, M. Rhee, K. Yates, T. Arsenlis, dans *SperComputing 2004*, « Scalable line dynamics in paradisi » (2004)
- [Cai 2004] – W. Cai, V. V. Bulatov, J. Chang, J. Li, S. Yip, dans « *Dislocations in Solids* », ed : F. R. N. Nabarro et J. P. Hirth, 12, 1 (2004)
- [Chaussidon 2006] – J. Chaussidon, M. Fivel, D. Rodney, *Acta Mater.*, 54, 3407 (2006)
- [Clouet 2008] – E. Clouet, S. Garruchet, H. Nguyen, M. Perez, C. S. Becquart (article soumis dans *Acta Mater.*)
- [Devincre 1992] – B. Devincere, M. Condat, *Acta Metall.*, 40, 2629 (1992)
- [Devincre 1994a] – B. Devincere, Thèse de Doctorat de l'Université d'Orsay (1994)
- [Devincre 1994b] – B. Devincere, L. P. Kubin, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2, 559 (1994)
- [Devincre 1995] – B. Devincere, *Sol. Stat. Com.*, 93(11), 875 (1995)
- [Devincre 1996a] – B. Devincere, dans « *Computer Simulation in Materials Science* », ed: H. O. Kirchner, V. Pontikis, L. P. Kubin, Kluwer Academic Publishers, Amsterdam, North-Holland, 309 (1996)
- [Devincre 1996b] – B. Devincere, S. Roberts, *Acta Metall.*, 74, 2891 (1996)
- [Devincre 2001] – B. Devincere, L. P. Kubin, C. Lemarchand, R. Madec, *Mater. Sci. Eng.*, A, 309-310, 211 (2001)
- [Devincre 2006] – B. Devincere, L. P. Kubin, T. Hoc, *Scripta Mat.*, 54, 741 (2006)
- [De Wit 1959] – R. De Wit, J. Koehler, *Phys. Rev.*, 116, 1113 (1959)
- [De Wit 1967] – R. De Wit, *Phys. Stat. Sol.*, 20, 567 (1967)
- [Domain 2005] – C. Domain, G. Monnet, *Phys. Rev. Lett.*, 95, 215506 (10) (2005)
- [Durinck 2007] – J. Durinck, B. Devincere, L. P. Kubin, P. Cordier, *American Mineralogist*, 92, 1346 (2007)
- [El-Azab 2000] – A. El-Azab, *Phys. Rev.*, B, 61, 11956 (2000)
- [Fivel 1997] – M. Fivel, M. Verdier, G. R. Canova, *Mater. Sci. Eng.*, A234-236, 923 (1997)
- [Fivel 1998] – M. Fivel, G. R. Canova, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 7, 753 (1998)
- [Foreman 1967] – A. J. E. Foreman, *Phil. Mag.*, 15, 1011 (1967)
- [Frederiksen 2003] – S. Frederiksen, K. Jacobsen, *Phil. Mag.*, 83, 365 (2003)
- [Ghoniem 1988] – N. M. Ghoniem, R. Amodeo, *Sol. Stat. Phenom.*, 3 et 4, 377 (1988)
- [Ghoniem 1997] – N. M. Ghoniem, M. Bacaloni, *Eng. Rept Ucla/Matmod*, 1 (1997)

- [Gómez-García 2000] – D. Gómez-García, B. Devincere, L. P. Kubin, dans « Mat. Res. Soc. Symp. Proc. », Ed: I. M. Robertson, H. D. Lassila, B. Devincere, R. Phillips, Warrendale, Pennsylvania, MRS, 578, 131 (2000)
- [Gómez-García 2006] – D. Gómez-García, B. Devincere, L. Kubin. Phys. Rev. Lett., 96(12), 125503 (2006)
- [Groh 2003] – S. Groh, Thèse de doctorat, Université d'Orsay (2003)
- [Hirth 1996] – J. P. Hirth, M. Rhee, H. M. Zbib, J. Comp. Mater. Design, 3, 164 (1996)
- [Kubin 1992] – L. P. Kubin, G. R. Canova, M. Condat, B. Devincere, V. Pontikis, Y. Bréchet, Sol. Stat. Phenom., 23 et 24, 455 (1992)
- [Lefebvre 2007] – S. Lefebvre, B. Devincere, T. Hoc, J. Mech. Phys. Sol., 55, 788 (2007)
- [Lemarchand 2001] – C. Lemarchand, B. Devincere, L. P. Kubin, J. Mech. Phys. Solids, 49, 1962 (2001)
- [Lépinoux 1987] – J. Lépinoux, L. P. Kubin, Scri. Metall., 21, 833 (1987)
- [Madec 2001a] – R. Madec, B. Devincere, L. P. Kubin, dans «Mat. Res. Soc. Symp. Proc. », Materials Research Society, 653, Z1.8.1 (2001)
- [Madec 2001b] – R. Madec, Thèse de Doctorat de l'Université d'Orsay (2001)
- [Madec 2002a] – R. Madec, B. Devincere, L.P. Kubin, Comp. Mat. Sci., 23, 219 (2002)
- [Madec 2002b] – R. Madec, B. Devincere, L. P. Kubin, Scripta Mat., 47, 689 (2002)
- [Madec 2002c] – R. Madec, B. Devincere, L. P. Kubin, Phys. Rev. Lett., 89, 255508 (2002)
- [Madec 2003] – R. Madec, B. Devincere, L. Kubin, dans « Mesoscopic Dynamics in Fracture Process and Strength of Materials », ed: Y Shibutani, H. Kitagawa, Kluwer, NLDordrecht (2003)
- [Mohles 1999] – V. Mohles, D. Ronnpagel, E. Nembach, Comp. Mater. Sci., 16, 150 (1999)
- [Mohles 2001] – V. Mohles, Phil. Mag. A, 81(4), 971 (2001)
- [Monnet 2004] – G. Monnet, B. Devincere, L. P. Kubin, Acta Mater., 52, 4317 (2004)
- [Monnet 2005] – G. Monnet, S. Queyreau, rapport eDF HT-27/05/045/A (2005)
- [Monnet 2006] – G. Monnet, Phil. Mag., 86, 5925 (2006)
- [Peach 1950] – M. Peach, J. S. Koehler, Phys. Rev., 80, 436 (1950)
- [Queyreau 2008] – S. Queyreau, Thèse de Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie (2008)
- [Rhee 1998] – M. Rhee, H. M. Zbib, J. P. Hirth, H. Huang, T. de la Rubia, Modell. Simu. Mater. Sci. Eng., 6, 467 (1998)
- [Rodney 1999] – D. Rodney, R. Phillips, Phys. Rev. Lett., 82(8), 1704 (1999)
- [Shin 2005] – C. S. Shin, M. C. Fivel, M. Verdier, C. Robertson, Mat. Sci. Eng., A400-401, 166 (2005)
- [Schwarz 1996] – K. W. Schwartz, J. Tersoff, Appl. Phys. Lett., 69(9), 1220 (1996)
- [Schwarz 1997] – K. W. Schwartz, Phys. Rev. Lett, 38, 4785 (1997)
- [Schwarz 1999] – K. W. Schwartz, J. Appl. Phys., 85, 108 (1999)
- [Tang 1998] – M. Tang, L. P. Kubin, G. Canova, Acta Mater., 46, 3221 (1998)
- [Tapassa 2007] – K. Tapassa, A. V. Barashev, D. J. Bacon, Y. N. Osetsky, Acta Mater., 55, 1 (2007)

- [Wang 2001] – Y. U. Wang, Y. Jin, A. Cuitino, A. G. Khachaturyan, *Appl. Phys. Lett.*, 78(16), 2324 (2001)
- [Weygand 2003] – D. Weygand, dans « *Proc. IUTAM Symposium, Osaka, Japan* », 23 (2003)
- [Xiang 2003] – Y. Xiang, L. T. Cheng, D. J. Srolovitz, E. Weinan, *Acta Mater.*, 51, 5499 (2003)
- [Zbib 2000] – H. M. Zbib, T. Diaz de la Rubia, M. Rhee, J. P. Hirth, *J. Nuc. Mater.*, 276, 154 (2000)

Chapitre IV

Durcissement induit par les carbures dans l'acier de cuve

Table de matières

Introduction	82
1- Revue bibliographique.....	82
1.1- Carbures dans l’acier de cuve	82
1.2- Durcissement induit par les précipités	83
1.3- Problématique du durcissement à basse température.....	86
2- Interaction avec une rangée périodique de particules.....	87
2.1- Conditions et résultats des simulations	87
2.2- Influence des différentes mobilités des dislocations.....	91
2.3- Prédiction du durcissement d’Orowan.....	97
3- Durcissement dans l’acier du cuve	104
3.1- Conditions des simulations	104
3.2- Résultats des simulations	105
3.3- Cas de la dislocation vis infinie dans une distribution aléatoire de particules....	107
3.4- Espacement effectif entre particules	110
3.5- Extension du modèle de durcissement.....	111
4- Nouveau modèle de durcissement par précipitation à basse température	112
Conclusions	115
Références bibliographiques	116

Introduction

Les carbures dans l'acier de cuve ou plus précisément dans les lattes de ferrite, constituent des obstacles infranchissables au mouvement des dislocations. Le durcissement induit par ces carbures dans le régime athermique a été étudié par Queyreau [Queyreau 2008].

Le problème de durcissement dans le régime thermique, qui fait l'objet de ce chapitre, est assez complexe puisqu'il fait intervenir différents facteurs : la température, la vitesse de déformation, le caractère des dislocations et l'espacement entre particules. De plus, il n'existe pas encore à ce jour de modèle de prédiction pour ce durcissement dans la littérature. Afin de cerner tous les angles du problème, on va adopter une méthodologie de travail qui consiste à effectuer des simulations modèles décomposant le problème étudié. Ainsi, on va commencer par étudier l'interaction d'une dislocation infinie avec une rangée périodique de particules. Cette étude sera suivie par l'étude de l'interaction d'une dislocation infinie avec une distribution aléatoire de particules. Et finalement, on va étudier le durcissement dans un cas représentatif de l'acier de cuve, c'est-à-dire contenant une microstructure réaliste de dislocations et une distribution de carbures représentative de celle observée dans les lattes de ferrite.

1- Revue bibliographique

1.1- Carbures dans l'acier de cuve

On a vu dans le premier chapitre qu'il existe deux types de carbures dans l'acier de cuve : les carbures repartis aux anciens joints austénitiques, et les carbures précipités au sein des paquets de lattes. Dans cette étude, en continuité du travail de thèse de Queyreau [Queyreau 2008], on va s'intéresser préférentiellement aux carbures se trouvant à l'intérieur des lattes de ferrite. Les observations faites au MEB et au MET [Carassou 2000, Hausild 2002] ont révélé une distribution homogène de carbures de forme sphérique. De ce fait, les carbures seront introduits dans nos simulations sous forme d'une distribution aléatoire de sphères. La densité surfacique des carbures dans les lattes de ferrite a été estimée [Queyreau 2008] à travers des micrographies réalisées au MEB par Monnet [Monnet 2006a]. Elle est considérée égale à 3.10^{12} m^{-2} . Quand à la taille de ces carbures, D , elle est considérée égale à $0,1 \mu\text{m}$. Cette dernière valeur est en bon accord avec le diamètre moyen évoqué dans d'autres travaux [Carassou 2000 – Hausild 2002 – Diawara 2007]. La relation entre les densités surfacique, ρ_s , et volumique, ρ_v , est donnée simplement par l'équation (1) [Nembach 1997].

$$\rho_v = \frac{\rho_s}{D} \quad (1)$$

En ce qui concerne la distance moyenne l entre carbures, elle peut être estimée à travers la relation (2) [Nembach 1997]. Elle est égale à $0,48 \mu\text{m}$.

$$l = \frac{1}{\sqrt{D\rho_v}} \quad (2)$$

Enfin, il faut noter que les carbures dans les lattes de ferrite sont considérés comme des particules impénétrables du fait de la forte incohérence existant entre la structure cristalline des carbures et de celle de la ferrite.

1.2- Durcissement induit par les précipités

Le durcissement structural induit par des précipités est un problème classique de la métallurgie physique [Mott 1940]. Plusieurs modèles ont été développés pour décrire les propriétés physiques qu'implique l'interaction d'une dislocation avec des particules incluses dans une matrice [Nembach 1997]. Dans le cas de particules impénétrables, le mécanisme d'interaction est appelé le mécanisme d'Orowan. Une dislocation mobile doit contourner les particules laissant derrière elle des boucles fermées autour de chaque particule dépassée. De nombreux modèles analytiques ont été proposés pour prédire la contrainte critique du durcissement dans des cas simples : une distribution uniforme et périodique de particules [Bacon 1973 – Shin 2003], des obstacles ponctuels [Foreman 1966 – Kocks 1967], etc. Ces modèles sont basés sur des formulations de tension de ligne simple décrivant la courbure d'une dislocation entre particules. L'expression la plus connue de la contrainte critique de durcissement a été proposée par Orowan [Orowan 1948]. Elle a été développée dans le cas d'une rangée périodique. Le schéma de la figure (1) montre le principe de base du calcul de cette contrainte.

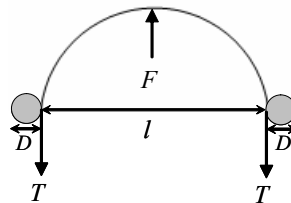


Figure 1 - Schéma de base du calcul de la contrainte critique du modèle d'Orowan [Orowan 1948].

En considérant une tension de ligne indépendante du caractère de la dislocation ($T = \mu b^2/2$), la contrainte critique, τ_{Orowan} , correspond à l'état instable où la force appliquée F et la tension de ligne T ne peuvent plus s'équilibrer mécaniquement :

$$\tau_{Orowan} = \frac{\mu b}{l} \quad (3)$$

Dans la plupart des cas, cette approximation surestime la contrainte critique car chaque section de la dislocation entre particules est considérée indépendante du reste de la ligne. En fait, les différentes parties de la ligne de la dislocation interagissent entre elles en raison d'un

champ de « self-contrainte » [Foreman 1966 – Brown 1971 – Bacon 1973]. A travers l'étude du cas particulier de l'interaction d'une dislocation infinie avec une rangée périodique de particules, Bacon et *al.* [Bacon 1973] ont mis en évidence les interactions dipolaires existant entre les parties d'une dislocation entourant une particule, comme le résume la figure (2). Leurs résultats montrent que ces interactions affectent à la fois la contrainte critique et la courbure de la dislocation entre particules.

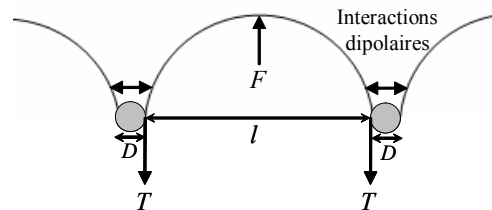


Figure 2 - Schéma de base du calcul de la contrainte critique du modèle de Bacon et *al.* [Bacon 1973].

L'effet des interactions dipolaires est traduit dans l'expression de la contrainte critique du modèle de Bacon et *al.*, τ_{BKS} , à travers une formulation modifiée de la tension de ligne T (équation (4)). En effet, la tension de ligne effective est alors considérée égale à l'énergie par unité de longueur des sections de la dislocation situées de part et d'autre des particules [Ashby 1969]. Le caractère de ces sections est coin quand la dislocation est initialement de caractère vis et il est vis quand la dislocation est au départ de caractère coin. Ceci est traduit dans l'expression de la tension de ligne T par l'intermédiaire du facteur A qui est égal respectivement à $1/2\pi$ et $1/2\pi(1-\nu)$ pour une dislocation coin et une dislocation vis.

$$T = A\mu b^2 \ln\left(\frac{\bar{D}}{b} + B\right) \quad (4)$$

Cette tension de ligne modifiée prend en compte la diminution de l'énergie de la dislocation du fait de l'interaction dipolaire à travers le facteur \bar{D} . Plus précisément, Bacon et *al.* relient ce nouveau paramètre au diamètre des particules D et à la distance entre particules l . \bar{D} est défini comme la moyenne harmonique de ces deux quantités $\bar{D} = (D^{-1} + l^{-1})^{-1}$. Cette formulation permet de satisfaire deux cas limites. D'un côté, quand l est très inférieur à D , on doit retrouver l à l'intérieur du logarithme ($X=l$) [Friedel 1964]. De l'autre côté, quand D est très faible devant l , les sections de la dislocation de part et d'autre de la particule doivent interagir fortement entre elles et, dans ce cas, $X=D$. Finalement, la constante d'ajustement B de l'équation (4) étant généralement proche de $\ln(2)$, on peut donc l'incorporer dans le facteur logarithmique en multipliant \bar{D} par 2.

Il faut noter que l'expression proposée par Bacon et *al.* converge vers la solution d'Orowan quand \bar{D} tend vers $50b$. Par conséquent, quand \bar{D} est très différent de $50b$, la contrainte d'Orowan ne correspond plus à la contrainte critique.

Sur la base de calcul de Bacon et *al.* [Bacon 1973], la contrainte critique pour une rangée infinie, τ_{BKS} , s'écrit donc :

$$\tau_{BKS} = A \frac{\mu b}{L_p} \ln \left(\frac{2\bar{D}}{b} \right) \quad (5)$$

Ce résultat a été récemment confirmé par les simulations de dynamique de dislocations [Queyreau 2008].

La considération d'une distribution aléatoire de particules a fait l'objet de plusieurs travaux dans la littérature [Brown 1971 – Bacon 1973 – Kocks 1977 – Nembach 1997]. Les modèles développés dans le cas d'une rangée périodique de particules ne sont pas exploitables directement dans le cas d'une distribution aléatoire. Une diminution de la contrainte critique, quand on passe du cas de la rangée infinie au cas de la distribution aléatoire, est notée dans nombreux travaux [Fridel 1964 – Foreman 1966 – Kocks 1977]. Friedel [Fridel 1964] a expliqué cette observation par le fait que la distance effective entre particules intervenant dans le processus d'interaction de la dislocation avec les particules devient plus grande que la distance moyenne entre particules. Cette proposition a été vérifiée dans le cas des obstacles faibles, et ne s'applique pas au cas des carbures. Dans le cas des obstacles forts, la distance effective entre carbures ancrant la dislocation n'est finalement pas connue.

A côté de ces descriptions théoriques du processus d'Orowan, des simulations de dynamique des dislocations à deux dimensions [Mohles 1999, 2001a] ont permis de calculer le durcissement par précipitation pour différents types de distributions. Plus récemment Monnet [Monnet 2006b] a étudié le cas d'une distribution tridimensionnelle des dislocations en interaction avec des particules introduites dans les plans de glissement sous forme de disques. Son travail a permis d'estimer, en 3D, le durcissement provoqué par la présence de deux familles distinctes de précipités. Le travail le plus récent de Queyreau [Queyreau 2008] repose sur un traitement tridimensionnel complet des carbures considérant une distribution aléatoire de particules sphériques de même taille. Un durcissement a été quantifié dans ces conditions et comparé aux prédictions de différents modèles analytiques [Orowan 1948 – Foreman 1966 – Kocks 1967 – Hirsch 1967 – Bacon 1973]. Queyreau a trouvé que les différences entre les prédictions des modèles et les résultats des simulations ne dépassent jamais 15%.

Enfin, il est généralement admis que la présence de particules de module élastique différent de celui de la matrice induit une force d'interaction entre dislocations et particules [Brown 1971 – Nembach 1997]. Ces forces ont été estimées dans le travail de Brown et *al.* [Brown 1971]. Leurs résultats montrent que ces forces d'interaction affectent peu le mécanisme d'Orowan et qu'elles peuvent être prises en compte avec un diamètre effectif pour les particules. Cette conclusion a été confirmée par les calculs de Shin et *al.* [Shin 2003], qui montrent que l'effet de ces interactions reste très faible (augmentation du durcissement de seulement 6%). Pour cette raison et pour s'inscrire dans la continuité du travail de Monnet [Monnet 2006b], les particules seront dans la suite de cette étude considérées comme des obstacles géométriques non cisillables et sans champ élastique associé.

1.3- Problématique du durcissement à basse température

Dans le régime athermique, l'étude du durcissement dans les lattes de ferrite a fait l'objet du travail de Queyreau [Queyreau 2008]. Dans ce régime, le mécanisme d'Orowan est contrôlé par la tension de ligne des dislocations. Le durcissement associé est statique et indépendant de la température. La figure (3) montre un exemple de simulations effectuées. Comme on peut le voir, les dislocations interagissent fortement avec les particules et les contournent. La mobilité isotrope des dislocations dans ce régime de température fait que les dislocations vis et les dislocations non-vis se courbent et se comportent toutes de la même manière.

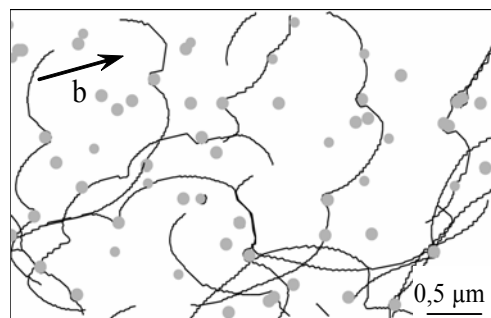


Figure 3 - Microstructure simulée des dislocations en interaction avec des carbures dans l'acier de cuve. La température de simulation est 300 K (régime athermique) [Queyreau 2008].

Dans le cas qui nous intéresse, c'est-à-dire à basse température, en plus de la tension de ligne, le comportement des dislocations est fortement influencé par la dynamique des lignes de dislocations qui est thermiquement activée. Il existe maintenant des mobilités de lignes différentes selon le caractère de la dislocation. Par conséquent, un nouveau paramètre physique doit être considéré afin de rendre compte de la différence de mobilité entre les différentes sections des dislocations.

Compte tenu de la complexité du problème étudié et du nombre de facteurs intervenant dans la composition du durcissement à basse température, les possibles mécanismes régissant l'interaction entre dislocations et carbures doivent être séparés. Nous avons donc opté pour la démarche suivante et décomposé notre étude en trois étapes successives :

- étude de l'interaction d'une dislocation infinie avec une rangée périodique de particules. De cette façon, on fixe le caractère de la dislocation et on s'affranchit du problème de la distribution. On peut ainsi étudier l'effet de la température et de l'espacement entre particules. Deux caractères de dislocations sont étudiés : vis et coin;
- étude de l'interaction d'une dislocation infinie avec une distribution aléatoire de particules. On adoptera la distribution modèle des carbures proposée pour les lattes de ferrite. Notre motivation pour cette étude est d'analyser, d'un côté, l'effet du caractère

de la dislocation dans le cas d’une distribution aléatoire. Et de l’autre côté, de déterminer une distance effective entre particules représentative de l’espacement moyen entre particules dans les lattes de ferrite. A travers cette distance, on pourra corrélérer le durcissement obtenu dans le cas de la rangée périodique à celui d’une distribution aléatoire ;

- étude tridimensionnelle du durcissement induit par une distribution aléatoire de particules dans le cas d’une microstructure réaliste de dislocations.

2- Interaction avec une rangée périodique de particules

2.1- Conditions et résultats des simulations

2.1.1- Démarche des simulations

Une dislocation libre de tout point d’ancrage est introduite dans la boîte de simulation avec des conditions aux limites périodiques. La forme et les dimensions de la boîte sont choisies de telle sorte que la ligne boucle sur elle même et que sa longueur soit égale à la diagonale de la boîte. La longueur de la dislocation à considérer dans la boîte de simulation étant fixée à $4,2 \mu\text{m}$, cette solution implique un volume de simulation de dimensions $1,7 \times 1,7 \times 3,4 (\mu\text{m})^3$ pour une dislocation coin et $2,4 \times 2,4 \times 2,4 (\mu\text{m})^3$ pour une dislocation vis.

Les particules sont introduites de telle manière que le plan de glissement de la dislocation coupe toutes les particules en leurs centres. Il est important de noter que l’utilisation des conditions aux limites périodiques assure, d’un côté, le caractère infini de la dislocation mobile et, de l’autre côté, la périodicité de la rangée de particules. La figure (4) montre un exemple de la boîte de simulation contenant deux particules dans le cas d’une dislocation vis.

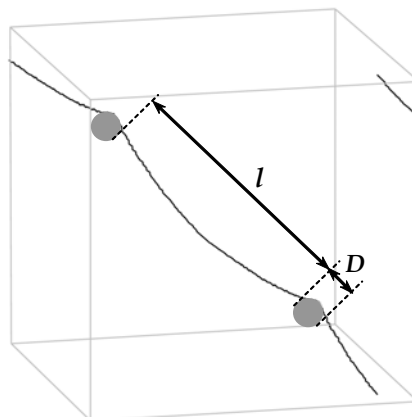


Figure 4 - Exemple de la boîte de simulation contenant une dislocation vis infinie et deux particules.

Le diamètre des particules, D , est pris égal à $0,1 \mu\text{m}$. L'espacement entre particules est fixé pour chaque simulation mais peut être modifié d'un calcul à l'autre. Ce dernier résulte simplement du nombre de particules considérées dans chaque boîte de simulation. Dans toutes les simulations réalisées, le nombre de particules a varié de 2 à 21, ce qui correspond à des espacements entre particules, l , variant de $0,1 \mu\text{m}$ à $2 \mu\text{m}$.

Les simulations sont effectuées avec un contrôle en vitesse de déformation. Cette dernière est initialement établie avec la relation d'Orowan impliquant la densité de dislocations dans la boîte ($4,3 \cdot 10^{11} \text{ m}^{-2}$ pour la dislocation coin et $3,1 \cdot 10^{11} \text{ m}^{-2}$ pour la dislocation vis), le vecteur de Burgers et la vitesse moyenne de la dislocation désirée. La vitesse imposée dans ces simulations a été fixée à $1 \mu\text{m/s}$. Cette dernière valeur de vitesse moyenne est déterminée d'après les valeurs expérimentales usuelles et calculée d'après la loi de mobilité des dislocations définie au chapitre II.

Deux paramètres physiques essentiels sont considérés: l'espacement entre particules et la température. Le durcissement est systématiquement calculé à l'aide des résultats de deux simulations, l'une sans les particules et l'autre avec les particules. Il correspond à la différence des contraintes maximales issues des deux simulations (équation (6)). On va l'appeler $\Delta\tau_p$ tout au long de ce travail.

$$\Delta\tau_p = \tau_c(\text{avec particules}) - \tau_c(\text{sans particules}) \quad (6)$$

Pour les quatre températures considérées (50, 100, 150 et 250 K), on a calculé le durcissement $\Delta\tau_p$ en fonction de l et de T , pour la dislocation vis et la dislocation coin.

2.1.2- Résultats des simulations pour la dislocation coin

Les résultats des simulations effectuées dans le cas de la dislocation coin, à différentes températures et avec différents espacements entre particules sont présentés dans la figure (5).

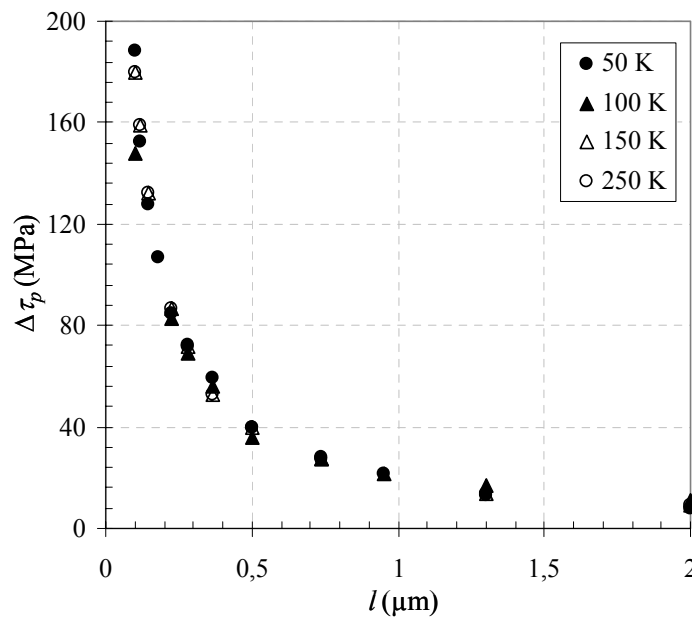


Figure 5 - Durcissement dû à l'interaction d'une dislocation coin infinie avec une rangée de particules, en fonction de l'espacement entre particules et de la température.

Dans cette figure, on voit que le durcissement augmente quand la distance entre particules diminue, mais surtout que le durcissement calculé est trouvé indépendant de la température. Afin d'analyser ce dernier point, on s'est intéressé à la configuration de la ligne de la dislocation entre particules à la contrainte critique. La figure (6) montre cette configuration pour les deux espacements extrêmes, 0,1 et 2 μm et pour les deux températures, 50 et 250 K.

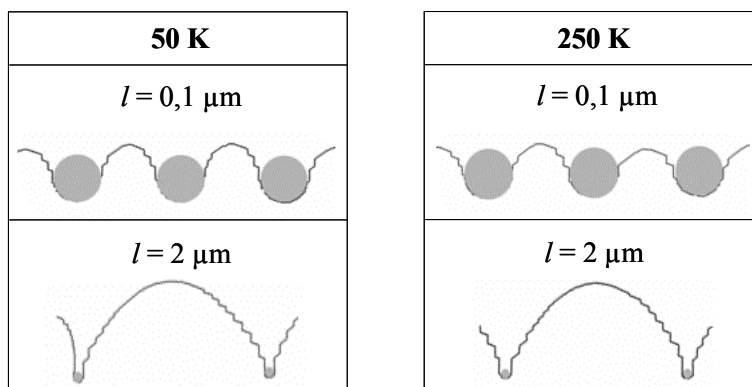


Figure 6 - Configurations critiques de la dislocation entre deux particules pour les deux températures et les deux espacements limites.

Comme on peut le remarquer, pour chaque espacement, on retrouve la même forme courbée de la dislocation quelque soit la température. Cette observation explique, en terme de tension de ligne, le fait qu'on trouve le même durcissement quelque soit la température pourvu que la vitesse des dislocations reste faible.

2.1.3- Résultats des simulations pour la dislocation vis

La mise en place de simulations avec une dislocation vis infinie est plus complexe à réaliser puisque la mobilité de celle-ci dépend de la longueur de la ligne et de la température (et/ou de la vitesse de déformation). Or, la dislocation vis définie pour ces calculs est théoriquement de longueur infinie via les conditions périodiques. Pour s'affranchir de ce problème, il faut définir une longueur de la dislocation vis maximale qui dans le cas présent a été fixée comme la diagonale de la boîte de simulation. Il faut noter que cet étalonnage revient seulement à imposer une référence pour le calcul du durcissement, qui ne réduit pas la généralité de nos résultats. De plus, cette longueur maximale n'intervient pas en cours des simulations dès lors qu'une faible rugosité le long de la ligne sectionne la direction vis en segment.

Pour les quatre températures considérées, on a calculé le durcissement $\Delta\tau_p$ en fonction de l . Dans la figure (7), par souci de concision, on a choisi de ne présenter que les résultats correspondant aux deux températures extrêmes, 50 et 250 K.

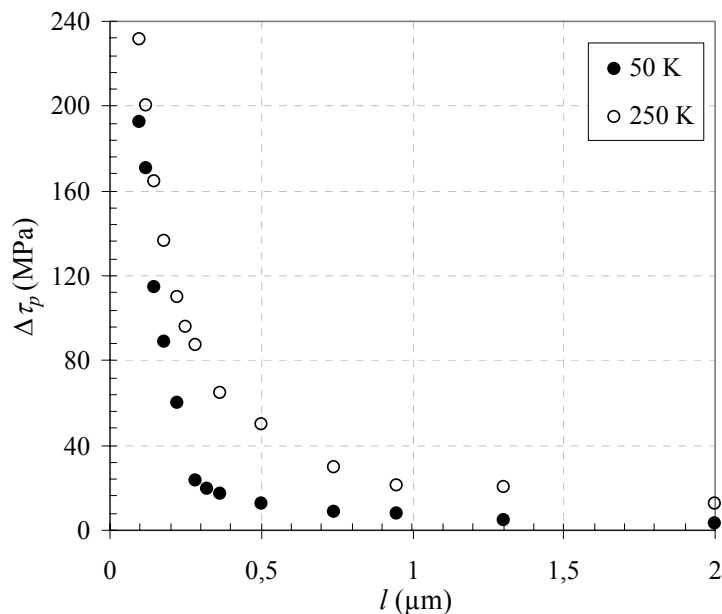


Figure 7 - Durcissement dû à l'interaction d'une dislocation vis infinie avec une rangée de particules en fonction de l'espacement entre particules. Deux températures sont présentées : 50 et 250 K.

Contrairement à la dislocation coin, le durcissement induit par les particules, dans ce cas, dépend fortement de la température. Lorsque la température s'approche de la température athermique (250 K), l'évolution du durcissement avec l'espacement est conforme au comportement vu pour une dislocation coin. En revanche, à basse température (50 K), on observe une variation du durcissement lente et faible pour les grandes distances entre particules, qui s'accélère brusquement à un espacement critique (de 0,3 μm à 50 K) pour rejoindre rapidement le durcissement observé à haute température. Il est cependant surprenant

de constater qu'à faible température et faible espacement la différence de mobilité entre dislocations vis et non-vis conduit toujours à une baisse du durcissement.

Pour montrer les différences de comportement observées pour la dislocation vis à petites et grandes valeurs de l , la forme critique de la dislocation entre particules est reproduite sur la figure (8).

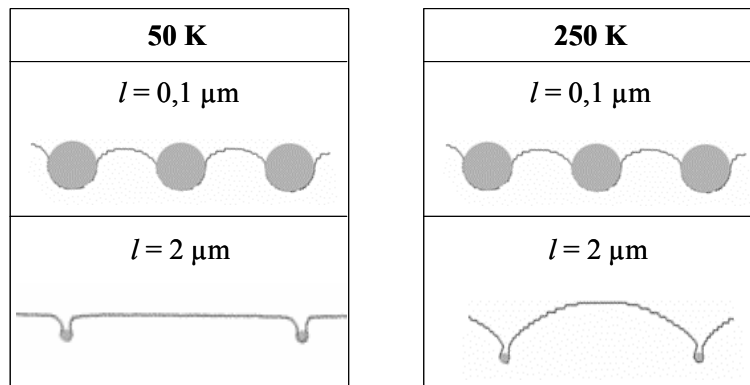


Figure 8 - Configurations critiques de la dislocation vis entre deux particules pour les deux températures et les deux espacements limites.

Pour le plus faible espacement, la configuration critique est, comme attendu, indépendante de la température. En prévision des discussions à suivre, on peut remarquer que la dislocation dans ce cas est toujours fortement courbée. Par contre, pour un grand espacement, la dislocation est droite à 50 K et est courbée à 250 K. Cependant la courbure observée à 250 K diffère sensiblement de celle reproduite en figure (6) pour une dislocation coin.

2.2- Influence des différentes mobilités des dislocations

L'interprétation des résultats rassemblés aux paragraphes précédents est complexe puisqu'il s'agit d'un problème à trois paramètres: l , T et K (K étant le rapport entre la mobilité des segments vis et des segments non-vis). Car, en plus de la dépendance en température et en longueur, il est évident, en regardant le film des simulations, que la contrainte critique dépend de la mobilité des sections courbées de caractère non-vis. C'est pour cela que, avant de proposer un modèle décrivant le durcissement simulé avec une dislocation vis (figure (7)), nous allons d'abord exposer quelques conséquences formelles des lois de mobilité définies au chapitre II.

2.2.1- Mécanismes de durcissement pour une dislocation vis

La contrainte nécessaire au déplacement d'une dislocation vis est donnée par l'équation (7) qui dérive directement de la loi de mobilité décrite au chapitre II (équation (19)). Cette contrainte sera appelé τ_{vis} .

$$\tau_{vis} = \tau_0 \left(\frac{kT}{\Delta H_0} \right)^2 A \sinh^2 \left(\frac{v}{2Hl \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right)} \right) + \tau_f, \quad (7)$$

où τ_f désigne le seuil constant de friction d'alliage. Dans cette équation nous pouvons identifier trois paramètres affectant la contrainte τ_{vis} , c'est-à-dire trois sources possibles de durcissement affectant la contrainte nécessaire pour déplacer une dislocation vis :

- la vitesse imposée à la dislocation, v , traduisant la dépendance en vitesse de déformation à travers la relation d'Orowan ;
- la température T rendant compte de l'activation thermique ;
- la longueur de la dislocation l , reflétant la microstructure.

Les effets de ces trois paramètres ne sont, bien sûr, pas équivalents mathématiquement. Par exemple comme nous le verrons plus tard dans ce chapitre, le rôle de la température qui intervient dans cette équation sous forme quadratique est plus important que celle des deux autres paramètres.

Ici, il faut rappeler que toutes les simulations ont été réalisées de telle façon que la vitesse des dislocations soit fixe et égale à 1 $\mu\text{m/s}$. Nous pouvons alors négliger, pour l'instant, la dépendance en vitesse. De ce fait, il ne reste à étudier que deux facteurs influençant le comportement de la dislocation vis, l et T .

2.2.2- Effet de longueur couplé à la température

A vitesse et température imposées, lorsque la longueur de la dislocation diminue de l_0 à l , la contrainte augmente. Cette augmentation de la contrainte sera notée $\Delta\tau$. D'après l'équation (7) celle-ci est de la forme :

$$\Delta\tau_l = \tau_0 \left(\frac{kT}{\Delta H_0} \right)^2 \left(A \sinh^2 \left(\frac{v}{2Hl \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right)} \right) - A \sinh^2 \left(\frac{v}{2Hl_0 \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right)} \right) \right) \quad (8)$$

Afin de montrer la dépendance de $\Delta\tau$ en l et en T , la figure (9) montre la variation de $\Delta\tau$ pour les différents espacements entre particules et les températures de simulations considérés.

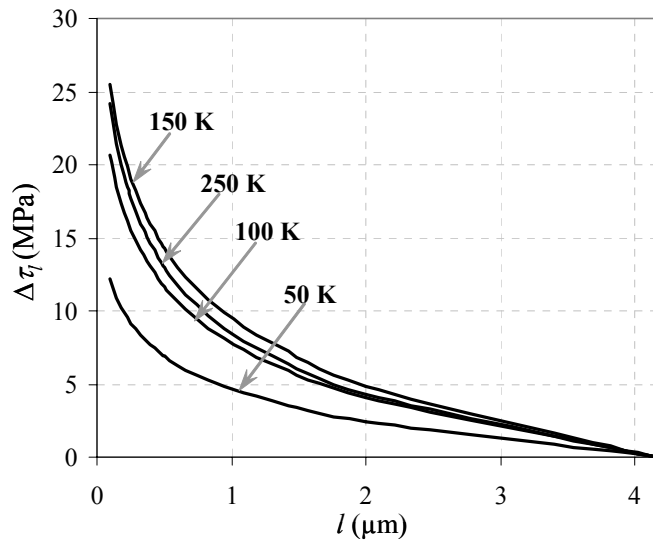


Figure 9 - Variation de $\Delta\tau$ en fonction de l pour les quatre températures de simulation considérées.

$\Delta\tau$ augmente donc systématiquement en diminuant la longueur. Par contre, à une longueur donnée, la dépendance en fonction de la température n’est pas simple. De l’équation (8) on prédit une augmentation de $\Delta\tau$ jusqu’à 150 K, puis, $\Delta\tau$ baisse avec la température. Dans tous les cas, $\Delta\tau$ reste relativement modérée.

Afin d’illustrer ce résultat important pour nos analyses, nous traçons dans la figure (10), $\Delta\tau$ pour une longueur initiale $l_0 = 4,2 \mu\text{m}$ et finale $l = 0,5 \mu\text{m}$.

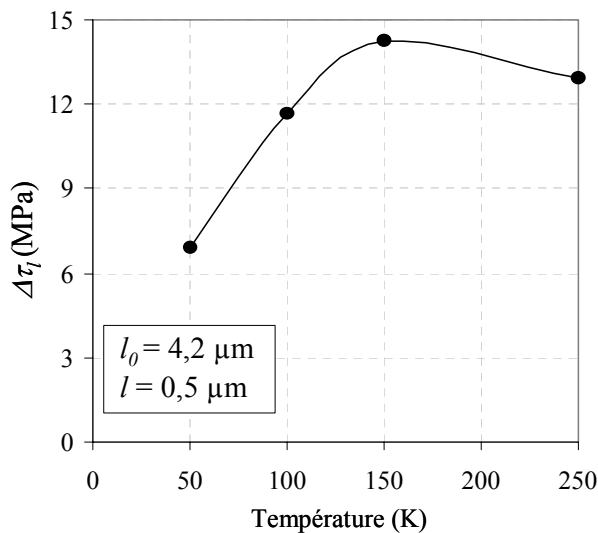


Figure 10 - Variation de $\Delta\tau$ en fonction de la température pour une réduction de longueur fixe, de 4,2 à 0,5 μm .

Pour rationaliser cette variation, nous pouvons étudier deux comportements asymptotiques. Dans le cas de mobilité à haute contrainte (ou à basse température), le sinus hyperbolique de

la loi de mobilité peut être approché par une fonction exponentielle. L'équation (8) se réduit alors à :

$$\Delta\tau_l = \tau_o \frac{kT}{\Delta H_o} \ln\left(\frac{l_o}{l}\right) \left[2 + \frac{kT}{\Delta H_o} \ln\left(\frac{v^2}{H^2 l_o l}\right) \right] \quad (9)$$

Dans cette équation, il est facile de constater que le durcissement dû à la longueur tend vers zéro lorsque la température s'approche du zéro absolu. Par ailleurs, le paramètre longueur se trouve à l'intérieur d'un logarithme, ce qui explique la faible sensibilité à la longueur et le durcissement modéré observé.

D'un autre côté, aux températures proches de la température de transition, la contrainte effective tend vers zéro et, par conséquent, le sinus hyperbolique de la loi de mobilité peut être approché par un développement limité. Ceci conduit à une formulation de $\Delta\tau_l$ de la forme :

$$\Delta\tau_l = \tau_o \left(\frac{1}{l^2} - \frac{1}{l_o^2} \right) \left(\frac{v kT}{2H \Delta H_o} \exp\left(\frac{\Delta H_o}{kT}\right) \right)^2 \quad (10)$$

Dans ce cas, $\Delta\tau_l$ doit diminuer avec la température. Ceci explique la deuxième partie de la courbe $\Delta\tau(T)$ de la figure (10). Enfin, à température fixe, le durcissement est proportionnel à l'inverse de l^2 . Ceci entraîne le fait que le durcissement devient plus sensible à l , en contraste avec la dépendance logarithmique trouvée à basse température (équation (9)).

Les étapes de calcul permettant d'aboutir aux approximations aux limites (équations (9) et (10)) sont présentées en annexe D.

2.2.3- Conséquence de l'écart de mobilités entre dislocations vis et non-vis

Lorsque la dislocation interagit avec les particules, elle se courbe localement au voisinage des particules. Les parties ainsi courbées ne sont pas de caractère vis et se déplacent en restant connectées avec des sections vis rectilignes. Ce comportement dynamique justifie des courbures observées le long des dislocations et qui dépendent directement de l'écart de mobilités entre les différentes sections le long d'une dislocation. En effet, si la contrainte nécessaire pour déplacer la dislocation vis à une vitesse imposée est donnée par l'équation (7), la contrainte τ_{coin} nécessaire pour déplacer des sections non-vis à la même vitesse est donnée par :

$$\tau_{coin} = \tau_o \left(\frac{kT}{\Delta H_o} \right)^2 A \sinh^2 \left(\frac{v}{2Kv_o \exp\left(-\frac{\Delta H_o}{kT}\right)} \right) + \tau_f \quad (11)$$

Cette équation (11) fait apparaître le rôle important de K , le rapport entre les vitesses des segments vis et des segments non-vis.

Il va de soi que la contrainte τ_{coin} est plus faible que τ_{vis} . A la limite d’élasticité, la contrainte appliquée est proche de τ_{vis} . Un segment non-vis dispose donc d’un ‘sur-chargement’ appliqué. Cette excédent de contrainte va être désigné dans la suite du chapitre comme $\Delta\tau_{coin}$ et correspond simplement à $(\tau_{vis} - \tau_{coin})$. Ce nouveau terme est essentiel et permet d’expliquer la majorité des résultats présentés dans la suite.

La formule exacte donnant $\Delta\tau_{coin}$ en fonction de toutes les variables est :

$$\Delta\tau_{coin} = \tau_0 \left(\frac{kT}{\Delta H_0} \right)^2 \left(A \sinh^2 \left(\frac{v}{2Hl \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right)} \right) - A \sinh^2 \left(\frac{v}{2Kv_0 \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right)} \right) \right) \quad (12)$$

Ici, il faut noter que $\Delta\tau_{coin}$ ne correspond pas à une augmentation de la contrainte effective sur la section non-vis. Mais cet excédent de contrainte est appliqué le long d’une ligne stable balancée par des contraintes internes ou plus généralement par une tension de ligne locale.

Comme pour le cas de $\Delta\tau$, afin de comprendre la variation de $\Delta\tau_{coin}$ avec la température, on donne un exemple de calcul pour une longueur l fixe, égale à $0,5 \mu\text{m}$. Dans la figure (11), on illustre ainsi la variation de $\Delta\tau_{coin}$ avec la température.

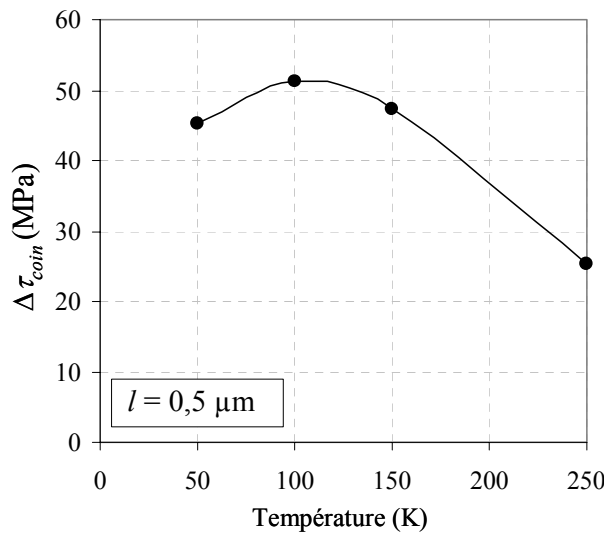


Figure 11 - Variation avec la température de $\Delta\tau_{coin}$, pour $l=0,5 \mu\text{m}$.

Comme on peut le constater sur cette figure, la variation de $\Delta\tau_{coin}$ avec la température comporte une fois encore deux régimes. $\Delta\tau_{coin}$ augmente jusqu’à atteindre un maximum situé aux alentours de 100 K et diminue pour les température plus élevées. Une telle variation est justifiée par deux comportements aux extrêmes :

A basse température et en utilisant les mêmes simplifications que celle utilisées pour l'équation (9) de $\Delta\tau_l$, on aboutit à la forme pour $\Delta\tau_{coin}$:

$$\Delta\tau_{coin} = \tau_0 \frac{kT}{\Delta H_0} \ln\left(\frac{Kv_0}{Hl}\right) \left(2 + \frac{kT}{\Delta H_0} \ln\left(\frac{v^2}{HlKv_0}\right)\right) \quad (13)$$

De cette formule, on retiendra que le facteur K étant dans le logarithme, son augmentation n'empêche pas $\Delta\tau_{coin}$ de tendre vers zéro lorsque la température s'approche du zéro absolu. Bien évidemment, cette tendance est modifiée lorsque les valeurs du facteur K augmentent d'une façon exponentielle avec une température décroissante.

En revanche pour les températures proches de la température de transition, la formule (12) se transforme en :

$$\Delta\tau_{coin} = \tau_0 (K^2 v_0^2 - H^2 l^2) \left(\frac{vkT}{2HlKv_0 \Delta H_0} \exp\left(\frac{\Delta H_0}{kT}\right) \right)^2 \quad (14)$$

Dans ce cas, la diminution de K avec la température s'ajoute à la diminution exponentielle dans le dernier terme de l'équation. Ceci explique la diminution observée sur la figure (11) aux plus fortes températures.

Comme dans le cas de $\Delta\tau_l$, les détails du calcul qui permettent d'aboutir aux formulations (13) et (14) sont présentés en annexe D.

2.2.4- Condition de stabilité de la ligne de la dislocation entre particules

Il semble important ici de donner une précision concernant la stabilité de la ligne de dislocation entre particules. Nous entendons par stabilité de la ligne, que la vitesse de la dislocation est la même quelque soit le caractère du segment le long de la ligne. Dans le régime athermique, cette condition est équivalente à l'équilibre quasi-statique. Mais dans notre cas, le caractère visqueux de la mobilité des dislocations ne nous permet plus d'utiliser ce terme. Une ligne est maintenant définie « instable » lorsque la vitesse locale des segments n'est pas uniforme et lorsqu'un contrôle en vitesse de déformation ne peut plus être réalisé. Dans la plupart des cas, cet état instable se caractérise par un déplacement très rapide des segments appartenant à des sections non-vis de la ligne.

La présence de $\Delta\tau_{coin}$ comme force motrice supplémentaire sur les segments non-vis, implique deux types de comportements possibles : (i) $\Delta\tau_{coin}$ correspond à une variation de *la contrainte effective* sur le segment. La ligne est alors instable, ce qui se traduit par l'acquisition d'une vitesse très élevée ; (ii) $\Delta\tau_{coin}$ ne correspond pas à une variation de *la contrainte effective* sur le segment pour une raison ou une autre (présence d'une courbure locale, contraintes internes, etc.). Dans ce cas, le segment ne dispose pas d'une force motrice supplémentaire pour se déplacer. Dans le cas simple de la tension de ligne, la condition de stabilité de la ligne se

traduit alors par la présence d'une courbure, de rayon R , induisant une force de rappel opposée à $\Delta\tau_{coin}$.

2.3- Prédiction du durcissement d'Orowan

Afin de comprendre l'impact des différents paramètres décrits plus haut sur le durcissement, nous allons discuter à nouveau séparément les cas de la dislocation vis et de la dislocation coin.

La courbure observée dans le cas de la dislocation coin, quelque soit la température et l'espacement entre particules, révèle le rôle prédominant de la tension de ligne. En d'autres termes, l'aspect thermiquement activé de la loi de mobilité ne doit avoir aucun impact sur le durcissement. De ce fait, il semble raisonnable de comparer nos résultats de simulations au modèle de Bacon et *al.* (BKS) [Bacon 1973] développé pour le régime athermique (équation (5)).

La figure (12) présente cette comparaison pour les deux températures 50 et 250 K. On notera que le modèle (BKS) dépend du module de cisaillement qui dépend lui-même de la température. Pour cette raison la dépendance en température du module de cisaillement est prise en compte dans la figure (12).

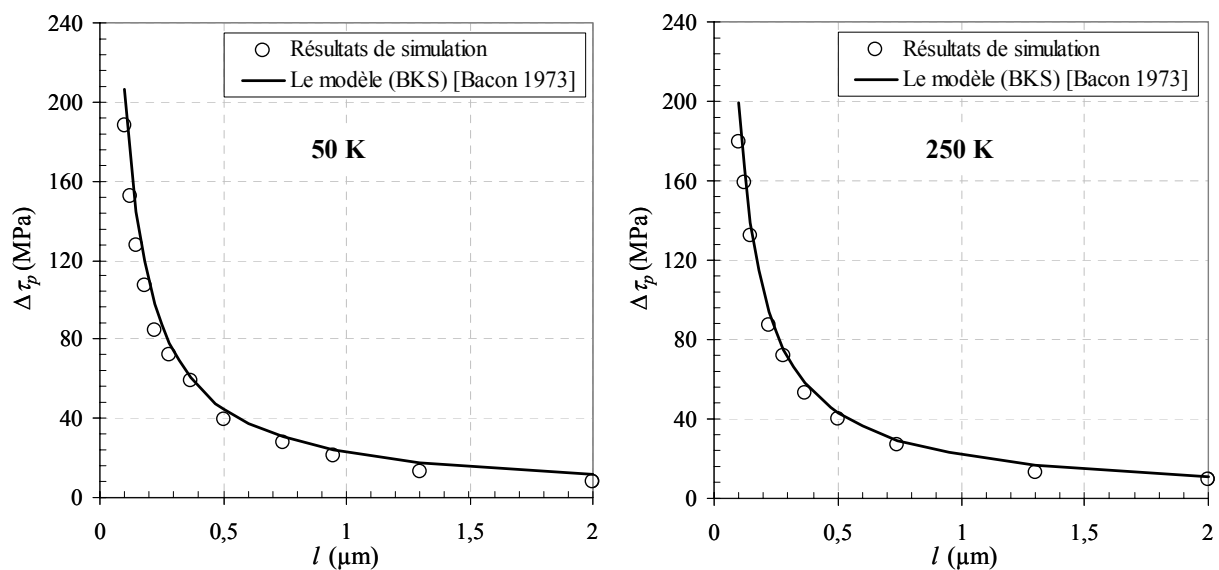


Figure 12 - Comparaison entre le durcissement obtenu à travers les simulations et celui déduit du modèle (BKS). Les résultats de deux températures sont présentés : 50 et 250 K.

On vérifie sur cette figure que nos résultats de simulations sont en bon accord avec la prédiction du modèle (BKS). On peut donc dire que dans le cas d'une dislocation coin en interaction avec des particules de $0,1 \mu\text{m}$ de diamètre, le mécanisme d'Orowan est athermique et indépendant de la vitesse de déformation. La raison essentielle pour laquelle la mobilité

réduite des segments vis ne joue pas de rôle ici est que l’attraction dipolaire entre les bras vis de part et d’autre des particules est forte. Cette attraction est alors suffisante dans tous les cas que nous avons simulés pour fournir la contrainte effective nécessaire aux segments vis pour se déplacer et contourner les particules.

En revanche, concernant la dislocation vis, le comportement simulé est radicalement différent. Aux points de contact avec les particules, la dislocation s’immobilise. La longueur initiale l_0 se trouve de ce fait réduite à l’espace l entre les points de contact avec les particules. Cette diminution de la longueur est ensuite accentuée par la courbure de la dislocation au voisinage des points de contact (cf. figure (13)). Si, à la contrainte maximale, le rayon de courbure des sections non-vis est R , la longueur restante de la section vis rectiligne est égale à $l - 2R$.

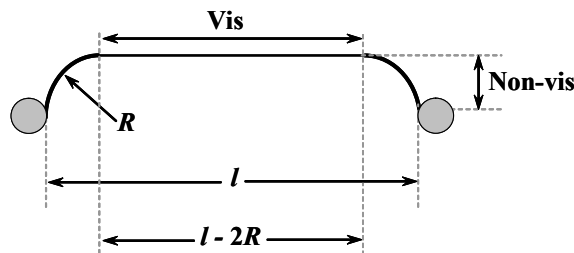


Figure 13 - Schématisation de la configuration critique de la dislocation entre deux particules.

Partant de cette analyse géométrique simple il faut encore différencier deux cas limites. En effet, selon que l’espace entre particules, l , est plus ou moins grand que deux fois le rayon de courbure de la section non-vis, le franchissement des particules va être radicalement différent.

2.3.1- Cas limite des larges espacements entre particules

Lorsque $l > 2R$, nous observons le comportement illustré sur la figure (14). Le passage de la dislocation vis s’accompagne d’une diminution de la longueur de l_0 à $l - 2R$. Dans ce cas, la contrainte appliquée doit s’ajuster pour compenser seulement la diminution de la longueur vis selon l’équation (9).

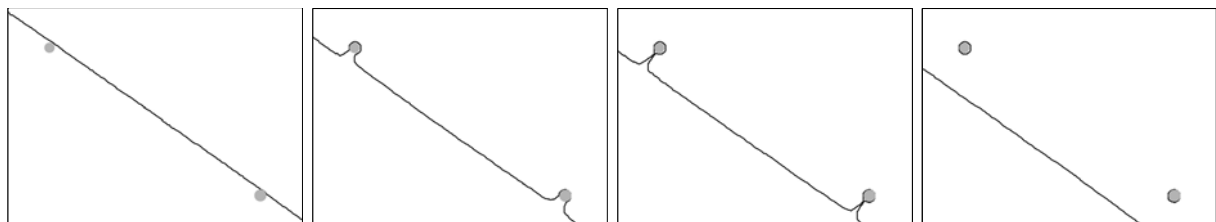


Figure 14 - Processus d’interaction d’une dislocation vis avec une rangée de particules ($T= 50$ K et $l = 2 \mu\text{m}$).

On peut noter, dans ce cas, que la partie non-vis, en contact avec les particules, se courbe continûment. Cette courbure ne « coûte » rien en termes de travail appliqué. Cette dernière observation doit alors être rapprochée de la présence d'une force motrice excédentaire $\Delta\tau_{coin}$, définie dans le paragraphe 2.2.3. Ainsi, lorsque la ligne de la dislocation avance, mais en restant stable, tout changement de caractère de vis en non-vis doit s'accompagner d'une courbure de rayon R le long des sections non-vis telle que :

$$\Delta\tau_l = \tau_0 \left(\frac{kT}{\Delta H_0} \right)^2 \left(A \sinh^2 \left(\frac{v}{2H(l-2R) \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right)} \right) - A \sinh^2 \left(\frac{v}{2Hl_0 \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right)} \right) \right) \quad (15)$$

La contribution du rayon de courbure R associée aux parties non-vis est importante dans l'équation (15). Il est donc important de déterminer cette dernière quantité avec une bonne précision.

Si l'on admet que R ne dépend que de la tension de ligne et de la force motrice supplémentaire $\Delta\tau_{coin}$, la stabilité de la ligne implique un équilibre entre $\Delta\tau_{coin}$ et la force de rappel de la tension de ligne $\Delta\tau_{TL}$ due à la courbure. Cette condition doit nous permettre d'évaluer le rayon de courbure R . Par souci de simplicité, on suppose que la partie courbée de la dislocation est de caractère coin et que l'expression de tension de ligne T_L choisie est celle de De Wit et *al.* [De Wit 1959] :

$$T_L = \frac{\mu b^2}{4\pi} \left(\frac{1-2\nu}{1-\nu} \right) \ln \left(\frac{R_{ext}}{r_0} \right), \quad (16)$$

où ν est le coefficient de Poisson, R_{ext} et r_0 sont respectivement le rayon de coupure extérieur et intérieur de l'énergie de ligne. Conformément aux résultats de Bacon et *al.* [Bacon 1973] discutés au début de ce chapitre, R_{ext} doit être de l'ordre de grandeur de la moyenne harmonique : $\bar{D}^{-1} = D^{-1} + l^{-1}$ et r_0 égal à $b/2$.

La stabilité de la ligne est alors vérifiée lorsque $\Delta\tau_{coin} = \Delta\tau_{TL}$. Ceci permet d'exprimer le rayon de courbure sous la forme suivante :

$$R = \frac{1-2\nu}{4\pi(1-\nu)} \frac{\mu b}{\Delta\tau_{coin}} \ln \left(\frac{2\bar{D}}{b} \right) \approx \frac{\mu b}{2\Delta\tau_{coin}} \quad (17)$$

A travers la variation de $\Delta\tau_{coin}$ avec l (équation (12)), on peut finalement évaluer le rayon de courbure R en fonction de l . Il faut noter ici que $\Delta\tau_{coin}$ varie faiblement avec la température, ce qui induit un faible effet de la température sur le rayon de courbure. Ainsi, R varie entre 0,15 et 0,17 μm pour les basses températures et entre 0,2 et 0,4 μm pour 250 K (figure (15)).

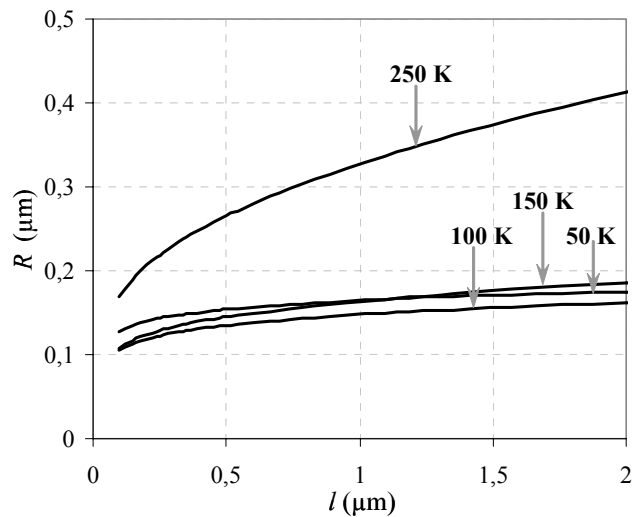


Figure 15 -Variation de R avec l’espacement entre particules pour les quatre températures simulées.

2.3.2- Cas limite des faibles espacements entre particules

Lorsque $l < 2R$, aucune section droite de caractère vis n’est conservée durant le déplacement de la dislocation. Au contact des particules, la dislocation vis initiale est systématiquement transformée en sections courbées de caractère non-vis, comme le montre la figure (16).

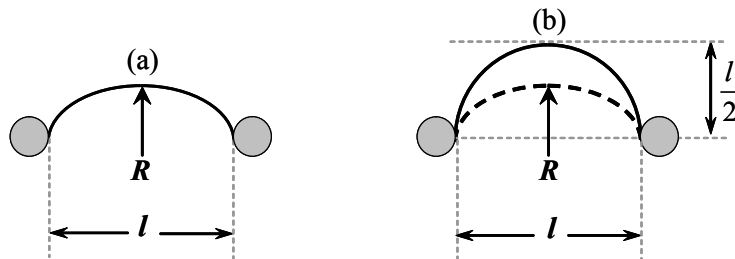


Figure 16 - Evolution de la configuration de la dislocation entre particules dans le cas où $l < 2R$: (a) état de la dislocation lorsque le segment vis est réduit à sa taille minimale et (b) la configuration de la dislocation à la contrainte critique.

Après disparition de toute section vis, la contrainte doit encore augmenter car la courbure acquise n’est pas suffisante pour contourner les particules. Dans ce cas, nous avons donc deux composantes de durcissement d’Orowan : $\Delta\tau_l$, qui doit accompagner la diminution de la longueur de la section vis jusqu’à sa taille minimale (figure (16-a)) et $\Delta\tau_{ath}$, l’incrément de contrainte athermique nécessaire pour augmenter la courbure jusqu’à la courbure critique (figure (16-b)). Pour prédire le durcissement, il faut alors évaluer $\Delta\tau_l$ et $\Delta\tau_{ath}$ séparément.

▪ Evaluation de $\Delta\tau$

Cette composante peut être évaluée à travers l'équation (8). Mais pour cela, il faut définir la longueur initiale, l_0 , ainsi que la longueur finale l_{min} . Cette dernière pose un problème en raison de la disparition de toute section vis droite. Quand la longueur vis diminue jusqu'à une valeur très faible, la loi de mobilité de la dislocation vis ne s'applique plus, puisque la présence d'un segment vis dans la vallée de Peierls n'est plus garantie. Aucune théorie ne peut ici nous venir en aide, car la définition du caractère d'une dislocation est avant tout une caractéristique atomique. Pour cela, on applique le raisonnement simple suivant : en raison de la différence fondamentale de mécanisme de mouvement entre les segments de caractères vis et non-vis, il reste toujours un segment de dislocation dans la vallée de Peierls. En revanche la détermination de cette longueur minimale n'est pas du ressort des modèles mésoscopiques. Elle est présente d'une façon naturelle dans nos simulations de DD en raison de la discrétisation finie des lignes. C'est pourquoi dans nos calculs, cette longueur l_{min} a été fixée à $0,025 \mu\text{m}$, c'est-à-dire à la longueur de discrétisation utilisée lors des simulations.

▪ Evaluation de $\Delta\tau_{ath}$

Comme illustré sur la figure (16-b), $\Delta\tau_{ath}$ représente la contrainte nécessaire pour déplacer jusqu'à sa courbure critique une dislocation déjà courbé par $\Delta\tau$. Notre démarche consiste alors à retrancher de la contrainte nécessaire pour courber une dislocation droite, la contrainte qui a provoqué la courbure initiale. La première est tout simplement la contrainte d'Orowan pour une rangée infinie de particules, que nous prenons égale à la contrainte prévue dans le modèle (BKS), $\Delta\tau_{BKS}$, et confirmée par nos simulations (figure (12)). Elle est donnée par :

$$\Delta\tau_{BKS} = \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)} \frac{b}{l} \ln\left(\frac{2\bar{D}}{b}\right) \quad (18)$$

Quant à la deuxième contrainte, elle doit correspondre à $\Delta\tau_{BKS}$ lorsque l'espacement entre particules, l , est égal à deux fois le rayon de courbure, R . En soustrayant ces deux termes on obtient donc, $\Delta\tau_{ath}$, sous la forme :

$$\Delta\tau_{ath} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \left(\frac{1}{l} - \frac{\Delta\tau_{coin}}{\mu b} \right) \ln\left(\frac{2\bar{D}}{b}\right) \quad (19)$$

Les deux composantes de durcissement étant définies, le durcissement attendu pour la dislocation vis doit satisfaire un bilan de la forme :

$$\Delta\tau_p = \Delta\tau_l + \Delta\tau_{ath} \quad (20)$$

ou encore, dans le cas de basse température:

$$\Delta\tau_p = \tau_0 \frac{kT}{\Delta H_0} \ln\left(\frac{l_0}{l_{min}}\right) \left(2 + \frac{kT}{\Delta H_0} \ln\left(\frac{v^2}{H^2 l_0 l_{min}}\right) \right) + \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \ln\left(\frac{2\bar{D}}{b}\right) \left(\frac{1}{l} - \frac{\Delta\tau_{coin}}{\mu b} \right) \quad (21)$$

D'après l'équation (21) il est aisé de vérifier que lorsque la température tend vers zéro, la première composante tend vers zéro et la deuxième tend vers le durcissement d'Orowan. Un résultat simple qui s'accorde avec notre intuition physique.

2.3.3- Comparaison entre les résultats de simulations et le modèle

Afin de valider les différentes équations définies aux paragraphes précédents, nous évaluons ci-après pour chaque espacement entre les particules simulé et chaque température, la force motrice, $\Delta\tau_{coin}$ et le rayon de courbure correspondant, R . Selon que $l > 2R$ où $l < 2R$, les formules de $\Delta\tau_p$ (équations (15) et (21)) sont appliquées. Le résultat de cette validation est rassemblé dans la figure (17).

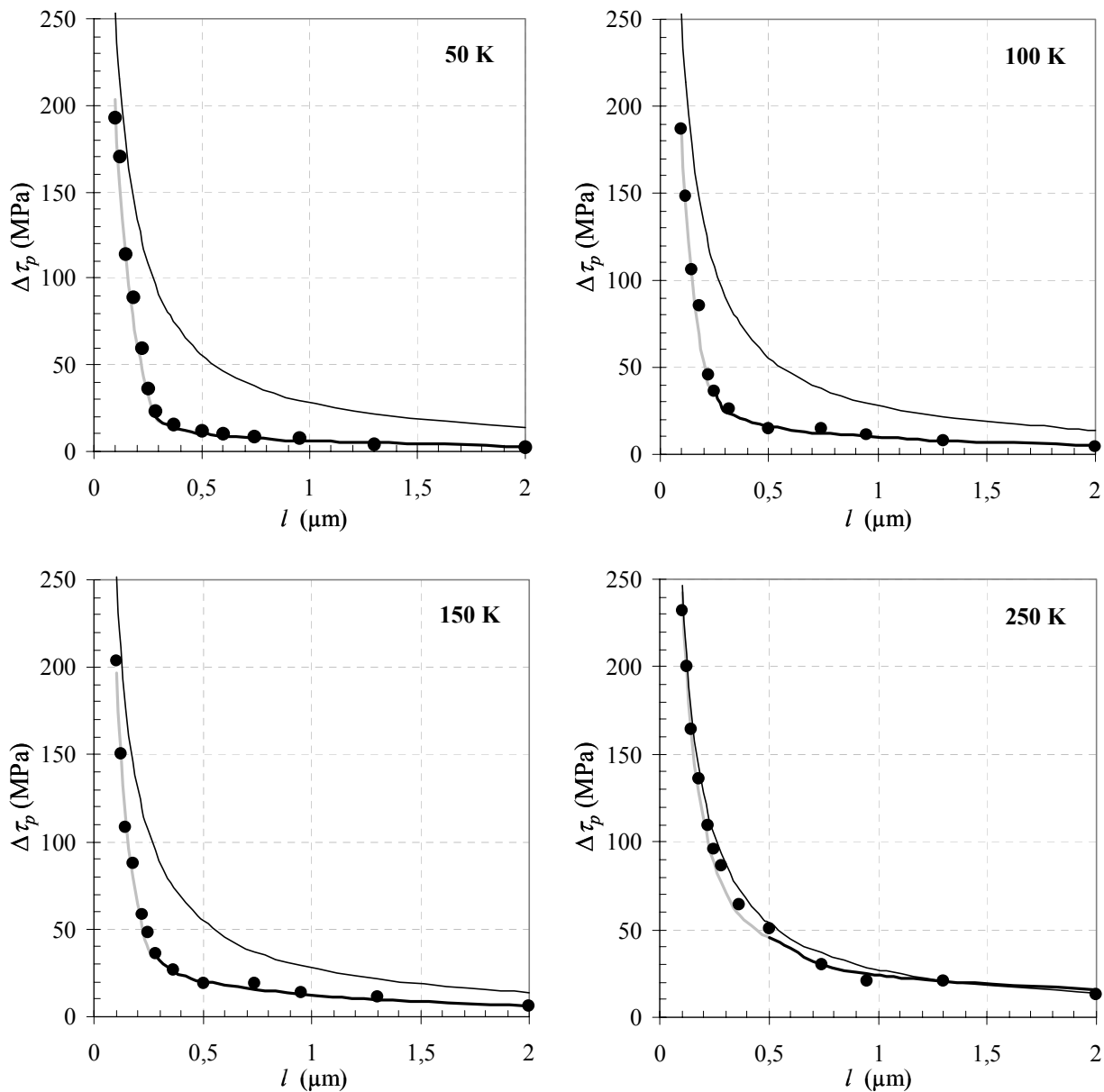


Figure 17 - Comparaison entre les résultats de simulation et la prédiction du nouveau modèle. Les résultats de simulation sont présentés en points noirs. La composante du modèle correspondant au cas $l > 2R$ est présentée en trait gras tandis que celle correspondant au cas $l < 2R$ est présentée en gris. La courbe en trait noir fin correspond au modèle (BKS).

Sur cette figure, le raccordement entre les deux courbes (noir et grise) se fait automatiquement à travers la distinction entre les deux cas : $l > 2R$ et $l < 2R$.

Comme on peut le constater, nos deux équations modèles (15) et (21) prédisant le durcissement par précipitation reproduisent très fidèlement nos résultats de simulations. L'identification des paramètres physiques contrôlant le durcissement structural à basse température est par là même validée.

En conclusion de cette section, on retiendra que dans tous les cas, le durcissement prévu par le modèle (BKS) est supérieur à celui de notre modèle et aux résultats des simulations. La présence d'un écart important de mobilité entre les sections de la dislocation de caractères différents ne peut qu'induire une diminution du durcissement par précipitation. Pour un grand espacement entre particules, le durcissement est purement de nature thermique, alors que pour un faible espacement une deuxième composante athermique apparaît due à la nécessité de courber la dislocation vis. Le durcissement athermique théorique d'Orowan n'est jamais atteint dans le régime thermique, quelque soit la température ou l'espacement entre particules.

3- Durcissement dans l'acier de cuve

3.1- Conditions des simulations

Dans cette partie, on va étudier le durcissement structural dans l'acier de cuve à travers une microstructure réaliste de dislocations et une distribution aléatoire de carbures. La taille de la boîte de simulation utilisée est $5 \times 3 \times 3 \text{ (}\mu\text{m)}^3$. Comme dans le cas des simulations faites pour valider les lois de mobilité des dislocations (*cf.* chapitre III), la microstructure initiale considérée est une microstructure de dislocations pré-déformée. Pour construire cette microstructure on part d'un ensemble de boucles de dislocations dipolaires constituées uniquement de segments coin et déformé à la température de simulation désirée et à la vitesse de 10^{-4} s^{-1} pour s'affranchir du stade 0. Ces boucles appartiennent aux système primaire $\langle 1\bar{1}1 \rangle (110)$ et ses systèmes dérivés (le système $\langle 1\bar{1}1 \rangle (\bar{1}01)$ et le système $\langle 1\bar{1}1 \rangle (0\bar{1}\bar{1})$). L'axe de traction choisi est tel que seul le système $\langle 1\bar{1}1 \rangle (110)$ est actif. Le facteur de Schmid sur ce système est maximum et égal 0,5. A basse température, la densité du système primaire après pré-déformation est constituée presque uniquement de longues dislocations vis, tandis qu'à plus forte température la densité des dislocations coin tend à s'approcher de la densité des dislocations vis. Dans tous les cas, la densité primaire en début de simulation est d'environ 10^{12} m^{-2} . Dans le tableau (1) on mentionne les densités de segments coin et segments vis en début de simulation.

A basse température, le libre parcours moyen avant annihilation des segments coin a été calculé à travers la méthode développée dans le chapitre III. Il est égal à $15,6 \mu\text{m}$. Ceci veut dire qu'en moyenne, les dislocations vis présentes dans la boîte ont cette longueur.

Température (K)	Densité des segments vis (m^{-2})	Densité des segments coin (m^{-2})
50	9,5. 10 ¹¹	0,6. 10 ¹⁰
100	9,4. 10 ¹¹	1,1. 10 ¹⁰
150	9,2. 10 ¹¹	1,4. 10 ¹⁰
250	7,8. 10 ¹¹	1,9. 10 ¹¹

Tableau 1 - Densités des segments vis et coin dans la microstructure initiale du système primaire en fonction de la température.

La taille et la densité de carbures sont celles mentionnées au paragraphe 1.1 ($D= 0,1 \mu\text{m}$ et $\rho_v= 3.10^{19} m^{-3}$). Le nombre de particules présentes dans la boîte de simulation est 1350.

Pour chaque température, 50, 100, 150 et 250 K, on a effectué deux simulations avec les mêmes conditions imposées : l’une sans particules et l’autre avec particules. La vitesse de déformation imposée est $10^{-4} s^{-1}$. La longueur de discrétisation est imposée par le rayon de courbure autour des précipités R (cf. les paragraphes précédents). Comme première approximation, ce rayon est supposé égal à $0,15 \mu\text{m}$ (cf. figure (15)). De ce fait, on a fixé une longueur de discrétisation égale à $0,05 \mu\text{m}$. Ce choix est justifié par le travail de Queyreau [Queyreau 2008], qui a étudié l’effet de la longueur de discrétisation sur la contrainte critique.

3.2- Résultats des simulations

Avant de quantifier le durcissement simulé, il est intéressant de présenter tout d’abord les microstructures obtenues pour les deux températures limites de 50 et 250 K (figure (18)).

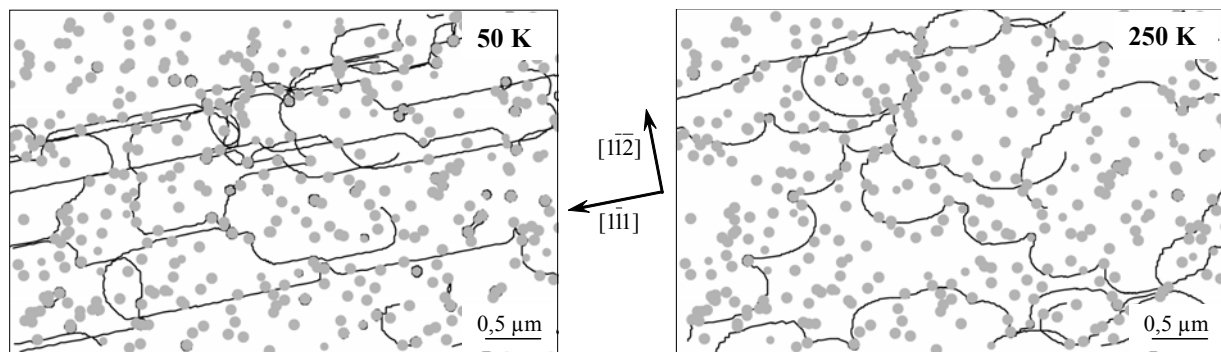


Figure 18 - Microstructures des dislocations simulées en présence de particules pour deux températures, 50 et 250 K. L’épaisseur de la lame est $1 \mu\text{m}$. Le plan d’observation est le plan de glissement du système primaire.

A 50 K, les dislocations vis sont droites et restent droites après interaction avec les particules. Par contre, à 250 K, les sections de dislocations entre particules sont fortement courbées. Ces observations sont donc consistantes avec celle déjà réalisées dans le cas simple de l’interaction d’une dislocation infinie avec une rangée de particules.

La figure (19) présente les courbes de traction obtenues pour le système primaire pour les quatre températures de simulation considérées. Les courbes grises correspondent au cas de

déformation sans particules et les courbes noires correspondent aux essais de déformation avec particules. Sur cette figure, on peut constater immédiatement que la différence entre les deux courbes (avec et sans particules), c'est-à-dire le durcissement, diminue quand la température diminue.

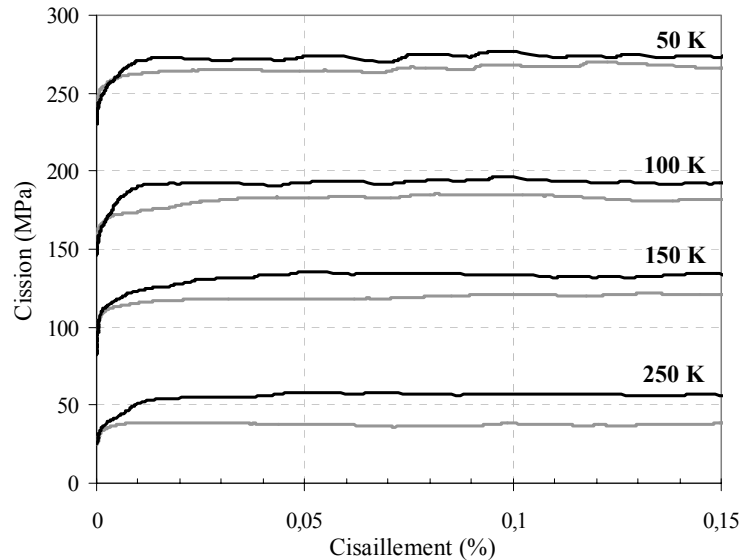


Figure 19 - Courbes de traction du système primaire en fonction de la température. En gris, les simulations sans particules et en noir les simulations avec particules. La vitesse de déformation est 10^{-4} s^{-1} .

Afin de quantifier ce durcissement, on détermine les contraintes critiques issues des simulations pour les deux cas : avec et sans particules. Ces valeurs sont obtenues en moyennant les valeurs de la contrainte sur un intervalle de cisaillement allant de 0,05 à 0,15%. Pour les simulations effectuées en présence de particules, on notera que le nombre de particules intersectées en fin de simulations est d'environ 800 particules. La figure (20-a) montre les contraintes critiques ainsi relevées. La figure (20-b) présente le durcissement associé.

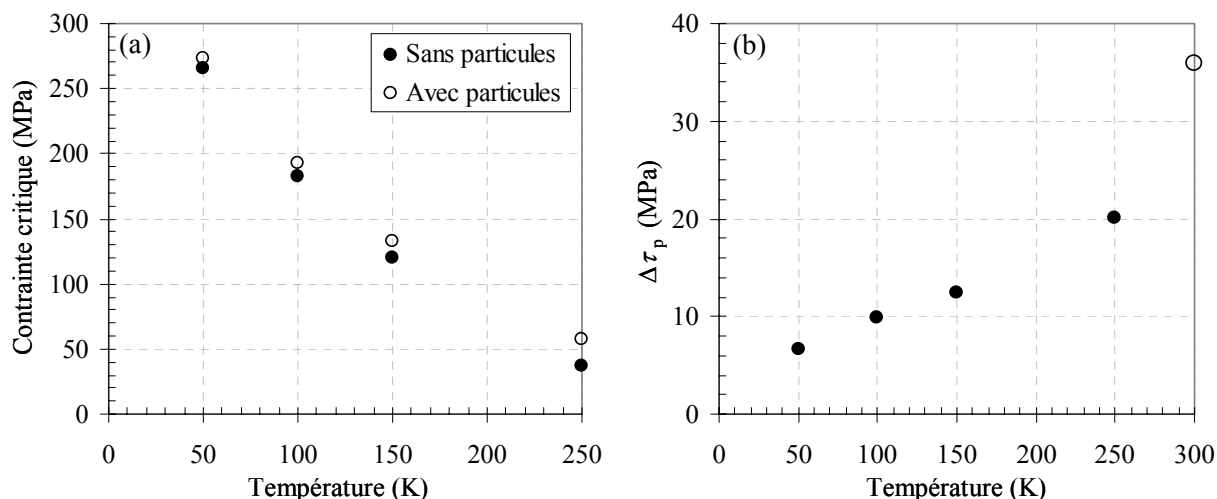


Figure 20 - (a) Les contraintes critiques relevées des courbes de traction de la figure (19). (b) Le durcissement calculé (les points noirs). Le point à 300K présente le résultat des simulations effectuées par Queyreau dans le régime athermique [Queyreau 2008].

Sur la figure (20-a), on voit que le durcissement reste faible devant la contrainte d'écoulement du matériau (entre 3 et 30% de la contrainte critique, respectivement entre 50 et 250 K). La figure (20-b) montre que, dans l'intervalle de température considéré, le durcissement diminue quand la température diminue. Par ailleurs on voit que le durcissement tend vers une valeur nulle lorsque la température tend vers zéro. Afin de comparer nos résultats avec ceux obtenus pour le durcissement dans le régime athermique, on a tracé sur la même figure le durcissement obtenu à 300 K avec une même distribution de carbures. Cette comparaison confirme que le durcissement observé dans le régime athermique n'est jamais atteint à basse température.

3.3- Cas de la dislocation vis infinie dans une distribution aléatoire de particules

Dans cette partie, la méthodologie utilisée pour les simulations de l'interaction de la dislocation vis infinie avec une rangée périodique de particules est de nouveau appliquée, mais cette fois-ci avec une distribution aléatoire de particules. En effet, dans cette nouvelle série de simulations, on a changé la distribution de particules en adoptant la distribution aléatoire représentative de l'acier de cuve. Le but de cette étude est de trouver le lien entre les simulations massives et les simulations d'une dislocation vis infinie. Dans cette optique, la taille de la boîte est choisie de telle sorte que la longueur de la dislocation vis (la diagonale de la boîte) soit de même ordre de grandeur que la longueur moyenne des dislocations vis dans le cas des simulations massives. La taille de la boîte est fixée, donc, à $(10 \times 10 \times 10 (\mu\text{m})^3)$. Elle est considérée assez grande pour s'affranchir du durcissement lié à l'accumulation de boucles d'Orowan autour des particules. En effet, avec les conditions périodiques aux limites, les dislocations sortent d'un côté de la boîte et rentrent par l'autre côté dans leur plan de

glissement initial. De ce fait, chaque dislocation revient exactement sur le même plan de glissement. Cet artefact de simulation risque de surestimer le durcissement calculé dans la mesure où le rayon des particules est modifié par les boucles d'Orowan formées lors des précédents passages de la ligne. Un lecteur intéressé par ce problème peut se référer au travail de Queyreau [Queyreau 2008] pour une estimation du durcissement lié à une telle accumulation de boucles d'Orowan. Dans notre cas, on veut mesurer seulement le durcissement généré par le premier passage d'une dislocation. Définir une simulation telle que cette condition soit satisfaite sans détruire le réalisme de nos calculs n'est pas trivial. Il faut en effet vérifier que l'aire balayée par la dislocation durant la déformation contient assez de particules pour être statistiquement représentative d'une microstructure expérimentale. Après vérification, la taille de la boîte de simulation définie ici donne une aire balayée par la dislocation contenant au moins 400 particules à l'arrêt des calculs. Ce nombre d'interactions vérifie largement le critère statistique défini par Monnet pour des simulations de durcissement structural [Monnet 2006b].

La figure (21) montre les microstructures obtenues pour la dislocation vis infinie en interaction avec la distribution aléatoire de particules pour les deux températures limites : 50 et 250 K.

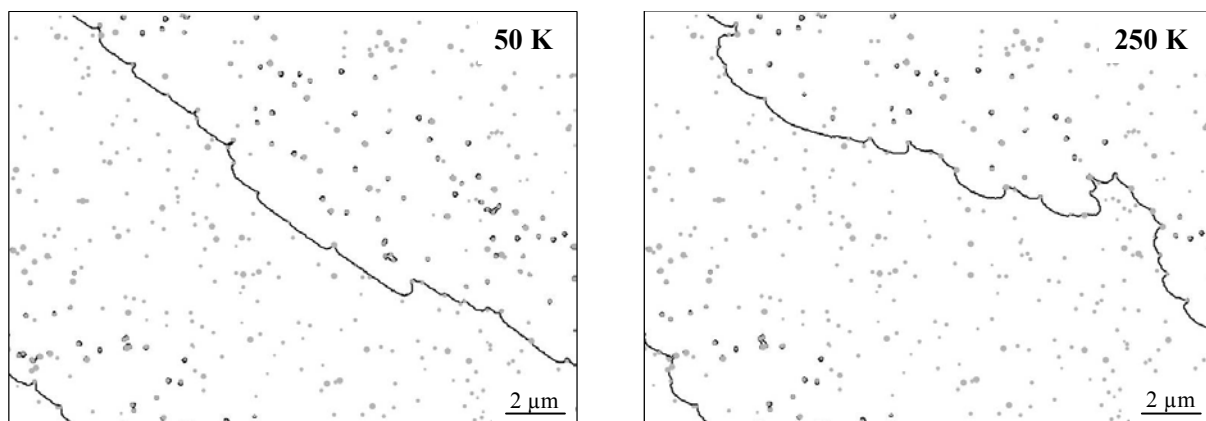


Figure 21 - Simulations de l'interaction d'une dislocation vis infinie avec une distribution aléatoire de particules pour deux températures, 50 et 250 K.

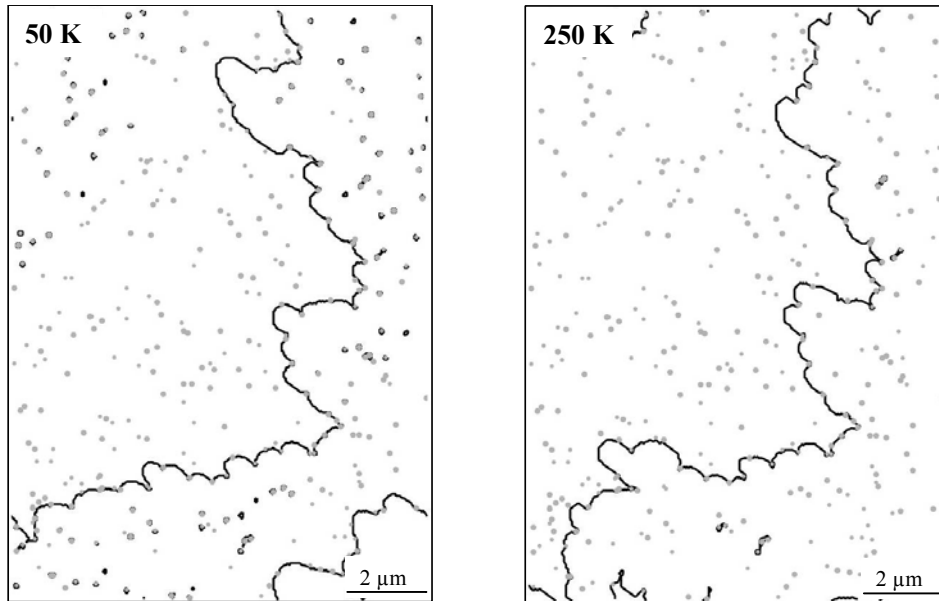


Figure 22 - Simulations de l’interaction d’une dislocation coin infinie avec une distribution aléatoire de particules pour deux températures, 50 et 250 K.

En comparant les deux images de la figure (21), on peut noter qu’au passage des particules, la courbure de la dislocation augmente avec la température. Pour comparaison, la figure (22) montre, dans les mêmes conditions, les microstructures obtenues dans le cas d’une dislocation coin infinie. La courbure de la dislocation dans ce dernier cas reste indépendante de la température. Ces observations sont donc conformes avec celles faites pour une dislocation infinie en interaction avec la rangée périodique de particules.

Une fois encore, pour les simulations de la dislocation vis infinie, un durcissement peut être calculé en comparant pour chaque température la contrainte critique issue des simulations avec et sans les particules. Les résultats de ce calcul sont rassemblés dans la figure (23) où sont données les valeurs de $\Delta\tau_p$ obtenues à travers les simulations massives (figure (20-b)) et celles obtenues à travers ces simulations avec une seule dislocation vis infinie.

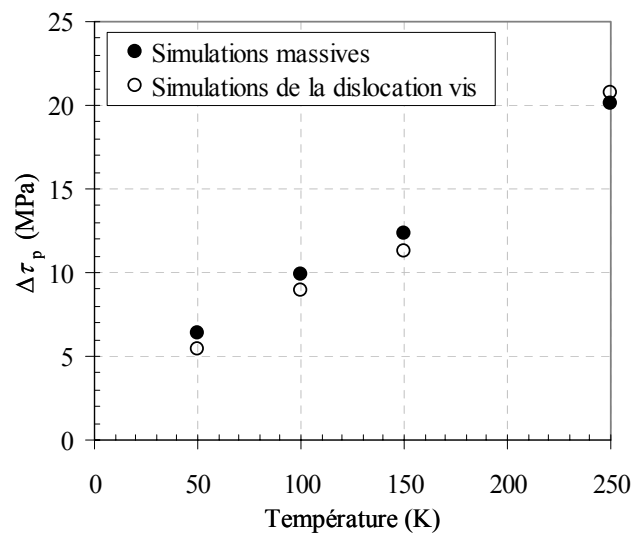


Figure 23 - Comparaison du durcissement calculé à travers les simulations massives et celui calculé à travers les simulations de la dislocation vis infinie.

Cette comparaison montre un très bon accord entre les deux types de simulations. Ceci prouve que la contrainte dans les simulations massives est contrôlée par le seul comportement des dislocations vis. Dans la mesure où la longueur de la dislocation vis est choisie de telle sorte qu'elle présente la longueur moyenne des dislocations vis dans la simulation massive, il semble suffisant d'expliquer l'évolution du durcissement pour une seule dislocation vis infinie en interaction avec une distribution aléatoire de précipité pour interpréter les résultats des simulations massives. Comme nous allons le détailler au paragraphe suivant, le point clé de cette dernière analyse est, en repartant de nos résultats obtenus dans le cas d'un réseau périodique de particules, de calculer l'espacement effectif l_{eff} entre particules représentatif d'une distribution aléatoire.

3.4- Espacement effectif entre particules

Dans une distribution aléatoire de particules, une dislocation rectiligne, comme la dislocation vis, voit un espacement entre particules le long de sa ligne supérieur à l'espacement moyen dans le plan. Pour calculer cette densité effective, il faut compter le nombre des particules dans un ruban caractéristique de la rugosité de la ligne, induite par l'interaction entre dislocations et particules (*cf.* figure (24)).

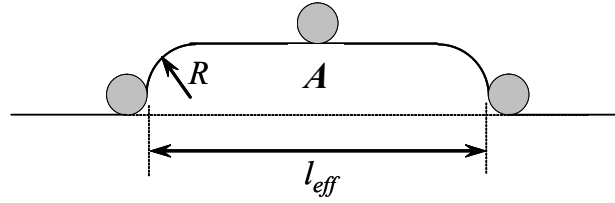


Figure 24 - Définition de l'aire de pavage A du plan de glissement de la dislocation vis avec une distribution aléatoire de particules.

Autrement dit, la dislocation est sensée réagir avec toutes les particules dont l'espace est inférieure à $R+D/2$. L'aire de pavage du plan, A , doit contenir une particule entière, comme le montre la figure (24). Par conséquent A correspond au produit $(l_{eff}+D)(R+D/2)$. Cette aire est nécessairement égale à l'inverse de la densité surfacique des particules ρ_s . C'est pourquoi l'espace effectif entre particules peut être écrit sous la forme :

$$l_{eff} = \frac{1}{\rho_s(R+D/2)} - D \quad (22)$$

Dans le cas qui nous intéresse de l'acier de cuve et pour simplifier les calculs à suivre, on va supposer que R est constant et égal à $0,16 \mu\text{m}$ (cf. paragraphe 3.1). L'application numérique donne alors $l_{eff} = 1,5 \mu\text{m}$.

Il faut noter que cette démarche pour calculer l_{eff} a initialement été utilisée par Louchet et al. [Louchet 1979], Rauch [Rauch 1993] et Tang et al. [Tang 1999] dans le cas du durcissement dû aux interactions entre dislocations et arbres de la forêt. Ces modèles seront décrits en détail dans le chapitre V.

3.5- Extension du modèle de durcissement

Dans le cadre d'une distribution aléatoire d'obstacles, le modèle de Louchet et al. [Louchet 1979] pour les obstacles de la forêt souligne qu'en fonction des positions relatives des lignes vis voisines, la libération de la dislocation peut se faire soit à travers le déplacement de la section vis soit à travers le déplacement des sections non-vis. Dans ce sens, il a été montré que l'aire balayée par les sections vis est égale à l'aire balayée par les sections non-vis. Cet aspect sera décrit plus en détails dans le chapitre V. Cependant, il est indispensable de retenir que ce phénomène a été constaté dans nos simulations avec une distribution aléatoire de carbures et que cela se traduit par une multiplication de la vitesse de déformation par un facteur 2 ($\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_{vis} + \dot{\gamma}_{non-vis} = 2 \dot{\gamma}_{vis}$). Dans ce cadre, à basse température, l'expression de $\Delta\tau$ correspondant à cette modification a la forme suivante :

$$\Delta\tau_l = \tau_o \frac{kT}{\Delta H_o} \ln\left(\frac{l_o}{l}\right) \left[2 + \frac{kT}{\Delta H_o} \ln\left(\frac{v^2/2}{H^2 l_o l}\right) \right] \quad (23)$$

A travers la longueur l_{eff} définie, nous pouvons calculer le durcissement à travers le modèle développé dans le cadre de la rangée périodique, mais en tenant compte de la modification discutée ci-dessus. Les valeurs trouvées sont comparées aux résultats de simulations massives sur la figure (25).

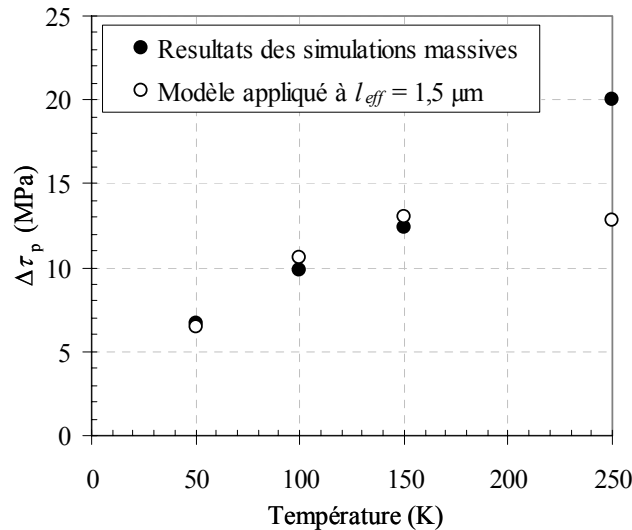


Figure 25 - Le durcissement issu des simulations massives comparé au cas de la rangée périodique de particules espacées de $l_{eff} = 1,5 \mu\text{m}$.

Comme on peut le constater, pour les températures 50, 100 et 150 K, le modèle de prédiction est en bon accord avec les résultats de simulations. Cependant, pour 250 K, on peut remarquer que la valeur issue du modèle est plus faible que celle résultant des simulations. Ceci est dû uniquement au fait que l'approximation qu'on avait faite pour calculer l_{eff} concernant la valeur du rayon de courbure R n'est pas justifiée à 250 K. Pour cette température, le rayon R varie entre 0,2 et 0,4 (cf. figure (15)). La valeur de l_{eff} est donc surestimée, ce qui induit un durcissement plus faible. En considérant $R = 0,3 \mu\text{m}$, on trouve une valeur du durcissement issue du modèle égale à 22,2 MPa, en accord avec le résultat de simulation.

A travers un espacement effectif entre carbures, l_{eff} , le modèle de prédiction du durcissement développé dans le cadre de la rangée périodique de particules est en mesure de déterminer le durcissement dans le cas complexe de la distribution aléatoire de carbures dans l'acier de cuve.

4- Nouveau modèle de durcissement par précipitation à basse température

Compte tenu de la complexité du processus d'interaction mis en jeu à basse température, nous allons résumer ici les principales conclusions du chapitre, en délimitant les contours de notre nouveau modèle de durcissement.

Au commencement du modèle se trouve la loi de mobilité pour les dislocations vis :

$$v_{vis}(\tau, T) = 2 H L \exp\left(-\frac{\Delta H_o}{kT}\right) \sinh\left(\frac{\Delta H_o}{kT} \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_o}}\right), \quad (24)$$

et celle pour les dislocations non-vis :

$$v_{non-vis}(\tau, T) = 2 K(T) v_o \exp\left(-\frac{\Delta H_o}{k_B T}\right) \sinh\left(\frac{\Delta H_o}{k_B T} \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_o}}\right) \quad (25)$$

A une température donnée et à une même contrainte effective τ^* , la vitesse de segments non-vis est proportionnelle à celle des segments vis avec un facteur de proportionnalité K . Lorsque la ligne de la dislocation est constituée de sections vis et de sections non-vis, nous avons vu que la stabilité de la ligne impose la présence d'une force de rappel sur les sections non-vis afin d'équilibrer un 'sur-chargement', $\Delta\tau_{coin}$. Dans le cas des lois de mobilité, rappelées ci-dessus, $\Delta\tau_{coin}$ peut être définie à basse température comme :

$$\Delta\tau_{coin} = \tau_o \frac{kT}{\Delta H_o} \ln\left(\frac{Kv_o}{Hl}\right) \left(2 + \frac{kT}{\Delta H_o} \ln\left(\frac{v^2}{HlKv_o}\right)\right), \quad (26)$$

où l est l'espacement moyen entre précipités. La force de rappel stabilisant les sections non-vis est essentiellement la courbure locale des dislocations, dont le rayon R a été dans notre cas calculé proche de $\mu b/2\Delta\tau_{coin}$.

Il faut noter ici que $\Delta\tau_{coin}$ et R varient peu avec la température. Comme ordre de grandeur pour les applications aux aciers de cuves, nous retiendrons des valeurs de 45 MPa et 0,15 μm , respectivement pour $\Delta\tau_{coin}$ et R .

L'évaluation de R permet ensuite de déterminer l'espacement effectif entre particules le long d'une dislocation vis :

$$l_{eff} = \frac{1}{\rho_s(R + D/2)} - D \quad (27)$$

Cette longueur l_{eff} est essentielle car elle détermine la façon avec laquelle une dislocation vis réagit avec les particules.

- Lorsque l_{eff} est grand : durcissement thermique à une composante

Pour les distributions dont l'espacement l_{eff} est supérieur à $2R$, le durcissement associé aux particules, $\Delta\tau_p$, est faible et de caractère purement thermique. Il résulte seulement de la dépendance en longueur des dislocations vis intervenant dans l'équation (24). Il s'écrit sous la forme :

$$\Delta\tau_p = \Delta\tau_l = \tau_o \frac{kT}{\Delta H_o} \ln\left(\frac{l_o}{l_{eff} - 2R}\right) \left[2 + \frac{kT}{\Delta H_o} \ln\left(\frac{v^2/2}{l_o(l_{eff} - 2R)H^2}\right)\right] \quad (28)$$

Cette équation fournit l'augmentation de la contrainte qui accompagne la diminution de la longueur des sections droites vis de l_0 , la longueur caractéristique des segments de dislocations sans précipités, à $l_{eff} - 2R$, la longueur moyenne des segments vis réagissant avec les particules. l_0 est difficile à déterminer expérimentalement, elle est liée à la dimension caractéristique du matériau. Par exemple, pour un matériau contenant une forte densité de dislocations, l_0 ne doit pas être très différente de $\rho^{-1/2}$, où ρ est la densité de dislocations dans le matériau. Par contre, pour un matériau avec une faible densité de dislocations, l_0 doit être reliée à une dimension caractéristique du type, taille du grain, dimension inter-lattes, etc.

Pour les températures les plus faibles, l'équation (28) se simplifie sous la forme :

$$\Delta\tau_p = \tau_o \frac{2kT}{\Delta H_o} \ln\left(\frac{l_0}{l_{eff}}\right) \quad (29)$$

A basse température, ce durcissement est, d'une part, proportionnel à la température et, d'autre part, diminue fortement lorsque la distance moyenne entre dislocation devient du même ordre que l'espacement entre particules. Le durcissement par précipitation dans le cas où les précipités sont largement espacés est donc faible, et ne peut que diminuer au cours de la déformation plastique puisque ce résultat n'est pas sensible au diamètre effectif des précipités.

- Lorsque l_{eff} est petit : durcissement à deux composantes, thermique et athermique

Lorsque les particules sont assez proches les unes des autres, le 'sur-chargement' $\Delta\tau_{coin}$ n'est plus suffisant pour atteindre la courbure critique autour des précipités. Il faut une énergie mécanique supplémentaire pour vaincre la tension de ligne de part et d'autre des précipités, donnant naissance à une composante athermique additionnelle au durcissement.

A très basse température, la composante thermique devient négligeable. Le durcissement final peut être déduit du durcissement prédit dans le modèle BSK pour une distribution aléatoire de particules :

$$\Delta\tau_p = \frac{\mu b}{2\pi l} \left(\frac{\ln^3(2\bar{D})}{\ln(l)} \right)^{1/2} - \Delta\tau_{coin} \quad (30)$$

Le comportement asymptotique de $\Delta\tau_p$ à très basse température dépend donc de $\Delta\tau_{coin}$, qui est une quantité difficile à mesurer ou calculer.

Conclusions

Le durcissement d'Orowan à basse température est un problème complexe. Pour l'étudier, nous avons d'abord commencé par déterminer le durcissement provoqué par un rangement périodique uniforme de précipités. Nous avons vu que le durcissement pour une dislocation coin infinie est identique à celui observé dans le régime athermique, alors que pour la dislocation vis, nous devons distinguer deux cas : (i) lorsque l'espacement des particules est large devant le rayon de courbure des segments non-vis, la dépendance en longueur de la vitesse de la dislocation vis provoque un durcissement thermique, alors que lorsque (ii) lorsque l'espacement est inférieur au rayon de courbure, un effort mécanique supplémentaire est nécessaire afin de courber la dislocation vis suffisamment pour contourner les particules. Dans ce régime, l'effet de longueur se traduit par une composante thermique et la résistance de ligne à la courbure supplémentaire conduit à une composante athermique importante. Lorsque la température diminue fortement, la composante thermique disparaît alors que la composante athermique augmente.

Dans l'acier de cuve, nos simulations ont montré que le durcissement par les carbures intralattes se trouve dans le cas de large espacement et le durcissement observé est par conséquent de nature thermique seul.

Nous avons proposé un modèle sans variable ajustée pour prédire le durcissement dû aux carbures à basse température. Ce modèle reproduit les résultats des simulations massives de dynamique des dislocations et confirme la diminution continue du durcissement lorsque l'on diminue la température.

Références bibliographiques

- [Ashby 1969] – M. F. Ashby, dans « Physics of strength and plasticity », MIT Press, Cambridge, Mass. (1969)
- [Bacon 1973] – D. J. Bacon, U. F. Kocks, R. O. Scattergood, *Phil. Mag.*, 28, 1241 (1973)
- [Brown 1971] – B. Brown, Ham, dans « Strengthening methods in solids », Essex (1971)
- [Carassou 2000] – S. Carassou, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris (2000)
- [De Wit 1959] – G. De Wit, J. S. Koehler, *Phys. Rev.*, 116, 1113 (1959)
- [Diawara 2007] – B. Diawara, stage de master IMAPC, Université Louis Pasteur de Strasbourg -eDF
- [Hausild 2002] – P. Hausild, Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Paris (2002)
- [Hirsch 1969] – P. B. Hirsch, F. J. Humphreys, dans « The physics of strength and plasticity », ed. A. S. Argon, M.I.T. Press (1969)
- [Foreman 1966] – A. J. E. Foreman, M. J. Makin, *Phil. Mag.*, 13, 911 (1966)
- [Fridel 1964] – J. Fridel, dans « Dislocations », Pergamon Press, Oxford (1964)
- [Kocks 1967] – U. F. Kocks, *Can. J. Phys.*, 45, 737 (1967)
- [Kocks 1977] – U. F. Kocks, *Mater. Sci. Eng.*, 27, 291 (1977)
- [Louchet 1979] – F. Louchet, L. P. Kubin, *Phil. Mag. A*, 39, 433 (1979)
- [Madec 2001] – R. Madec, Thèse de doctorat, Université de Paris XI (2001)
- [Mohles 1999] – V. Mohles, D. Rönnpapel, E. Nembach, *Comp. Mater. Sci.*, 16, 144 (1999)
- [Mohles 2001a] – V. Mohles, *Mater. Sci. Eng.*, A309-310, 265 (2001)
- [Mohles 2001a] – V. Mohles, *Phil. Mag.*, A81, 971 (2001)
- [Mohles 2003] – V. Mohles, *Phil. Mag. Let.*, 83, 9 (2003)
- [Mohles 2004] – V. Mohles, *Mater. Sci. Eng.*, A365, 144 (2004)
- [Monnet 2006a] – G. Monnet, Observations réalisées au MEB au sein du Département MMC-eDF-Site des Renardières
- [Monnet 2006b] – G. Monnet, *Phil. Mag.*, 86, 5927 (2006)
- [Mott 1940] – N. F. Mott, F. R. N. Nabarro, *Proc. Phys. Soc.*, 52, 86 (1944)
- [Nembach 1997] – E. Nembach, dans « Particle strengthening of metals and alloys », New York, Wiley (1997)
- [Orowan 1948] – E. Orowan, *Symposium of Internal Stresses in Metals and Alloys*, London (1948)
- [Queyreau 2008] – S. Queyreau, Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie (2008)
- [Rauch 1993] – E. Rauch, Thèse de HDR, Institut National Polytechnique de Grenoble (1993)
- [Shin 2003] – C. S. Shin, M. C. Fivel, M. Verdier, K. H. Oh, *Phil. Mag.*, 83, 3691 (2003)
- [Tang 1999] – M. Tang, B. Devincre, L. P. Kubin, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 7, 893 (1999)

Chapitre V

Durcissement associé aux interactions entre dislocations

Table de matières

Introduction	119
1- Durcissement de la forêt dans les cristaux de structure cubique centrée.....	119
1.1- Classement des interactions entre dislocations dans la structure cubique centrée	120
1.2- Propriétés quasi-statiques des jonctions et durcissement athermique.....	122
1.3- Modèles du durcissement de la forêt dans le régime thermique.....	124
2- Simulations du durcissement dans le régime thermique.....	133
2.1- Conditions des simulations	134
2.2- Résultats des simulations	134
3- Prédiction du durcissement.....	141
3.1- Analyse géométrique	141
3.2- Modèle de prédiction du durcissement	143
4- Comparaison des résultats des simulations avec les autres modèles.....	148
Conclusions	151
Références bibliographiques	153

Introduction

Dans ce chapitre, on va étudier la deuxième source du durcissement existant dans l'acier de cuve, à savoir, l'interaction entre dislocations. On commencera par une courte revue bibliographique de nos connaissances sur les mécanismes du durcissement par la forêt. On s'intéressera tout particulièrement à trois modèles du durcissement développés dans le régime thermique pour mettre l'accent sur leurs différences. Dans un deuxième temps, les résultats des simulations seront présentés. Lors de ces simulations, seul le cas de l'interaction entre des dislocations vis et une forêt d'obstacles, donnant des jonctions « dures », sera étudié. Les résultats des simulations seront ensuite analysés avec le modèle développé au chapitre IV pour les carbures. Les forces et les faiblesses de ce modèle seront finalement comparées avec celles des modèles existant dans la littérature.

1- Durcissement de la forêt dans les cristaux de structure cubique centrée

Lorsqu'une dislocation mobile rencontre une autre dislocation qui traverse son plan de glissement, le champ de distorsion élastique de la dislocation mobile se superpose à celui de la dislocation obstacle. Cette réaction élastique induit localement une augmentation ou une diminution de l'énergie élastique selon que les distorsions s'additionnent ou se compensent. Exprimées en termes de forces, ces réactions induisent une répulsion ou une attraction à courte distance entre dislocations qui peuvent être très fortes près des points de contact. Dans certains cas, ces forces attractives sont suffisantes pour permettre une recombinaison entre dislocations, formant ainsi un segment de ligne appelé jonction. En fonction de la nature du vecteur de Burgers de ces jonctions, on peut distinguer le cas des jonctions sessiles et le cas des jonctions glissiles. Dans tous les cas, les points triples aux extrémités des jonctions ancrent les deux lignes initiales. Pour détruire une jonction, il faut appliquer une contrainte forte sur les sections des dislocations formant les « bras » de la jonction afin de créer une tension de ligne venant « dézipper » (ou détruire) le segment jonction.

Plusieurs paramètres affectent la stabilité des jonctions : (i) la nature des systèmes mis en jeu qui définit les propriétés de la réaction, (ii) l'orientation relative et la longueur des dislocations interagissant, (iii) le chargement appliqué. A l'échelle atomique, des simulations ont permis de mettre en évidence le fait que la stabilité des jonctions est essentiellement un problème de minimisation de l'énergie élastique [Bulatov 1998 – Rodney 1999] qui peut être résolu dans un continuum élastique. Ces simulations atomiques ont permis de valider les hypothèses faites dans le premier modèle analytique visant le calcul de la contrainte critique de stabilité des jonctions [Saada 1960]. A l'échelle mésoscopique, des simulations de dynamique des dislocations ont permis d'étudier plus particulièrement l'importance de l'orientation relative entre dislocations interagissant pour former une jonction ; aussi, elles ont

permis de montrer l'existence d'un nouveau type de réactions faibles, appelé « état croisé » [Wickham 1999]. Ces premiers calculs sur les jonctions furent ensuite repris de manière systématique par de nombreux auteurs afin de cartographier l'ensemble des interactions possibles dans les structures CFC, CC, HC, etc. [Madec 2001, 2002, 2004 – Kubin 2003 – Monnet 2004]. Un même travail de cartographie des réactions pouvant exister dans la structure CC a été effectué par Perrera Da Costa [Perrera Da Costa 2004]. Le résultat de cette étude préliminaire est repris dans le mémoire de thèse de Queyreau [Queyreau 2008].

On retiendra surtout des études sur la stabilité d'une jonction, que le passage aux échelles supérieures est un problème complexe. Il est, en effet, très difficile d'intégrer les mesures de la stabilité d'une jonction isolée pour prédire une contrainte d'écoulement macroscopique. C'est dans ce cadre que les simulations DD prennent tout leur sens.

L'étude du franchissement de la forêt par des simulations DD a connu ces dernières années un développement important [Madec 2002 – Devincere 2006 – Bulatov 2006]. Cependant, à l'exception du travail de Tang et *al.* [Tang 1998] et de Monnet et *al.* [Monnet 2004] (pour le zirconium), toutes les simulations réalisées ont porté sur des matériaux déformés dans un régime athermique. Dans le régime thermique, nos connaissances se limitaient essentiellement à des modèles analytiques [Louchet 1979 – Rauch 1994 – Tang 1999] qui n'ont pas encore été confrontés à des résultats de simulations.

Comme dans le cas des carbures (chapitre IV), les mécanismes physiques intervenant lors de la destruction des jonctions ne doivent pas être les mêmes dans les régimes athermique et thermique. C'est pourquoi, on s'attend à ce que des simulations du franchissement de la forêt dans le cas du fer déformé à basse température nous apportent des informations originales nécessaires pour valider ou invalider les hypothèses faites dans les modèles de prédiction du durcissement [Louchet 1979 – Rauch 1994 – Tang 1999].

1.1- Classement des interactions entre dislocations dans la structure cubique centrée

Comme dans toutes les structures cristallographiques, il faut distinguer dans la structure CC différentes classes de réactions entre dislocations suivant la nature des systèmes de glissement interagissant. Pour illustrer ce point, on liste ci-dessous l'ensemble des réactions pouvant exister entre systèmes de glissement de type $[1\bar{1}1] \{110\}$. Pour simplifier cette description on utilise la nomenclature des systèmes de glissement définie dans le tableau (1) et qui est celle utilisée dans le code de simulations DD, microMégas.

Numéro	Plan	Vecteur de Burgers	Numéro	Plan	Vecteur de Burgers
1	(110)	$[\bar{1}\bar{1}1]$	7	$(\bar{1}\bar{1}0)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$
2	$(\bar{1}01)$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	8	(101)	$[\bar{1}\bar{1}1]$
3	$(0\bar{1}\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}1]$	9	$(01\bar{1})$	$[\bar{1}\bar{1}1]$
4	$(0\bar{1}1)$	$[1\bar{1}1]$	10	$(1\bar{1}0)$	$[1\bar{1}\bar{1}]$
5	$(10\bar{1})$	$[1\bar{1}1]$	11	$(\bar{1}0\bar{1})$	$[1\bar{1}\bar{1}]$
6	$(\bar{1}10)$	$[1\bar{1}1]$	12	(011)	$[1\bar{1}\bar{1}]$

Tableau 1 - Numérotation des douze systèmes de glissement $[\bar{1}\bar{1}1]\{110\}$ dans la structure CC avec la convention du code microMégas.

En considérant le premier système du tableau (1) comme système de référence, les interactions possibles entre dislocations prises deux à deux se réduisent à trois types de réactions :

- des interactions sans contact, où les plans de glissement ne s'intersectent pas. C'est par exemple l'interaction du système 1 avec lui-même ou avec le système 7. La première interaction est conventionnellement appelée une interaction « dipolaire ». La seconde est nommée « coplanaire » puisque les deux systèmes glissent dans des directions coplanaires ;
- des interactions permettant une annihilation des lignes de dislocations. C'est le cas de l'interaction du système 1 avec le système 2 ou le système 3. Elle correspond au cas où les dislocations ont des vecteurs de Burgers opposés. Ces interactions sont nommées, « colinéaires » [Devincre 2005] ;
- des interactions conduisant à la recombinaison de deux dislocations dont les vecteurs de Burgers sont b_1 et b_2 , pour former un segment jonction dont le vecteur de Burgers est (b_1+b_2) . C'est le cas des intersections entre le système 1 et les systèmes 4, 5, 6, 8, 9, 10, 11 et 12. Madec et Kubin [Madec 2005] ont répertoriés les jonctions ainsi formées dans le cas de la structure CC en trois catégories. Ces dernières sont classées en fonction de la direction et du vecteur de Burgers de la jonction, l_j et b_j respectivement (*cf.* figure (1)). Pour le faire, ils ont défini les angles φ entre l_j et b_j , θ_1 entre l_j et le vecteur de Burgers du premier système, b_1 et θ_2 entre l_j et le vecteur de Burgers du deuxième système, b_2 . Le résultat de ce classement est reproduit dans le tableau (2) et permet d'identifier trois types de jonctions. La force moyenne d'ancrage de chaque jonction est différente et sera définie au paragraphe suivant.

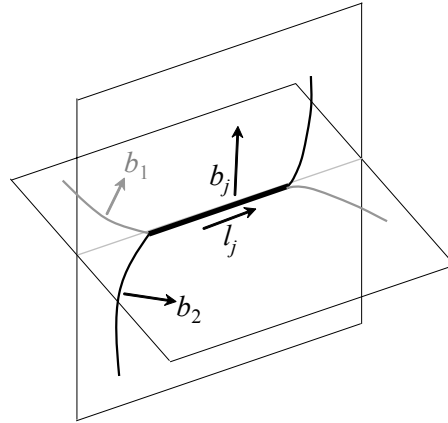


Figure 1- Définition des vecteurs l_j , b_j , b_1 et b_2 intervenant lors de la construction d'une jonction en quasi-statique (dans le régime athermique).

Type de la jonction	Systèmes	l_j	b_j	φ	θ_1	θ_2
Mixte symétrique	4 et 11	$[\bar{1}11]$	$[0\bar{1}0]$	$54,7^\circ$	$70,5^\circ$	$70,5^\circ$
Mixte asymétrique	5, 8, 9 et 12	$[1\bar{1}\bar{1}]$	$[0\bar{1}0]$	$54,7^\circ$	0°	$70,5^\circ$
Coin	6 et 10	$[001]$	$[0\bar{1}0]$	90°	$54,7^\circ$	$54,7^\circ$

Tableau 2 - Les trois types de jonctions formées entre systèmes de glissement $[\bar{1}\bar{1}1]\{110\}$ dans un cristal CC. La nomenclature des systèmes de glissement est définie dans le tableau (1).

1.2- Propriétés quasi-statiques des jonctions et durcissement athermique

Comme dans le cas des matériaux de structure CFC [Saada 1960 – Friedel 1961], dans le régime athermique, la déformation plastique des métaux CC est fortement modifiée par l'existence des interactions fortes entre dislocations glissant dans des plans sécants.

Depuis le travail de Saada et Friedel [Saada 1960], on sait que l'ancrage des dislocations mobiles par une « forêt » de dislocations venant couper leur plan de glissement est essentiellement un problème de tension de ligne. La contrainte critique d'écoulement sur un système mobile correspond à la contrainte nécessaire pour vaincre la tension de ligne qui s'oppose à la courbure des dislocations entre les jonctions qui immobilisent localement les dislocations. C'est pourquoi, l'équation du durcissement de la forêt fait intervenir la distance moyenne entre jonctions dans la microstructure des dislocations, soit l'inverse de la racine carré de la densité des dislocations coupant le plan de glissement des dislocations mobiles, ρ_f .

$$\tau_c = \alpha \mu b \sqrt{\rho_f} \quad (1)$$

A travers une analyse simple basée sur la tension de ligne, on vérifie que dans l'équation de Taylor (équation (1)), le coefficient α est effectivement une mesure de la force moyenne des interactions entre dislocations. Cette dernière quantité est difficile à identifier précisément car

elle est fonction de nombreux paramètres tels que la longueur moyenne des jonctions, la nature exacte des jonctions formées dans la microstructure en fonction du mode de sollicitation, de la densité totale des dislocations, etc. C'est pourquoi, des méthodes alternatives, visant le calcul de la résistance moyenne d'une microstructure de dislocations, ont été proposées au début du développement des simulations de dynamique des dislocations [Foreman 1966 – Hernandez Olivares 1987]. Pour une revue de ces modèles, le lecteur pourra se tourner vers deux articles importants [Brown 1971 – Sevillano 1993]. Dans ces modèles d'ancrage ponctuel, la résistance des obstacles est traitée de manière phénoménologique à travers un angle critique θ mesurant la force moyenne d'une réaction. Bien sûr, une équivalence simple peut être faite entre les mesures de α et de θ . En première approximation $\theta = \cos^{-1}(\alpha)$, soit $\theta \approx 70^\circ$ avec $\alpha \approx 0,35$. Comme nous le verrons dans la suite de ce chapitre, la description simplifiée d'un ancrage ponctuel de la forêt est une solution retenue souvent pour le développement d'un modèle analytique.

Pour déterminer la force d'interaction correspondant à chaque type de jonction considérée séparément, Franciosi [Franciosi 1985] a proposé une formulation modifiée de l'équation de Taylor (équation (1)). Dans l'équation (2), la contrainte critique relative à un système i fait intervenir maintenant des coefficients d'interactions a_{ij} mesurant l'interaction entre ce système et chaque système de la forêt, j . On appelle usuellement cette forme, une équation de Taylor généralisée puisqu'elle prend une forme tensorielle et fait apparaître la densité de chaque système de la forêt, ρ_j .

$$\tau_c^i = \mu b \sqrt{\sum_j a_{ij} \rho_j} \quad (2)$$

On notera cependant que cette expression pour être tout à fait exacte, doit, en pratique, être modifiée, afin de rendre compte d'une déviation logarithmique de la tension de ligne lorsque la densité des dislocations augmente [Schöeck 1972]. L'importance de cette correction a été soulignée ces dernières années à travers les travaux de Madec et *al.* [Madec 2002]. Pour cette raison, Devincre et *al.* [Devincre 2006] ont proposé une formulation de la contrainte critique pour l'interaction entre familles de systèmes de glissement prenant en compte explicitement la dépendance logarithmique :

$$\tau_c^i = \mu b \frac{\ln(1/b\sqrt{\beta\rho^j})}{\ln(1/b\sqrt{\beta\rho_{ref}^j})} \sqrt{\beta\rho^j}, \quad (3)$$

avec ρ^j est la densité d'un système j et ρ_{ref}^j est une densité de référence à laquelle le coefficient β d'interaction entre i et j , est déterminé.

Dans le régime athermique, les coefficients d'interactions définissant la résistance moyenne de chaque type de jonctions ont été calculés par simulations DD et pour des matériaux de structure CC [Madec 2004 – Queyreau 2008]. Le tableau (3) résume les coefficients a_{ij} déterminés pour une densité de la forêt de 10^{12} m^{-2} .

Réaction	Jonction mixte symétrique	Jonction mixte asymétrique	Jonction coin	Colinéaire
a_{ij}	$0,063 \pm 0,006$	$0,036 \pm 0,006$	$0,039 \pm 0,005$	$0,525 \pm 0,039$

Tableau 3 - Coefficients d'interaction entre dislocations dans la structure CC, déterminés par DD à travers des simulations de l'écroutissage latent [Queyreau 2008].

Du tableau ci dessus, on retiendra que pour les jonctions entre les systèmes de glissement $[\bar{1}\bar{1}1]\{110\}$, la jonction mixte symétrique est la plus forte, suivie de la jonction mixte asymétrique et de la jonction coin. Ces résultats sont en bon accord avec la mesure globale faite par Queyreau en considérant une densité de la forêt de 10^{12} m^{-2} et qui dans le cas de la structure CC donne un coefficient de Taylor, $\alpha \approx 0,3$. Le durcissement de la forêt dans les CC à haute température ou à grande déformation est donc tout à fait comparable à celui dans les CFC. Les simulations de Queyreau [Queyreau 2008] montrent ainsi que la petite diminution de la stabilité des jonctions trouvée dans les CC en comparaison avec celle dans les CFC est certainement compensée par un plus grand nombre de réactions colinéaires.

1.3- Modèles du durcissement de la forêt dans le régime thermique

A travers l'article de revue de Keh et Weissmann [Keh 1963], on a compris assez tôt que le durcissement de la forêt va être fortement modifié dans le cas d'un matériau CC déformé dans le régime thermique. Dans ce régime, la microstructure des dislocations est très anisotrope et est essentiellement formée de dislocations vis. A la fin du stade 0, ces dislocations commencent à se déplacer et des réactions de contact entre des longues dislocations vis sont nécessairement fréquentes. De même, la morphologie des jonctions formées va être influencée par la friction du réseau. L'ensemble de ces effets va abaisser le durcissement de la forêt et induire des écarts par rapport à la relation de Taylor (équation (1)). Ce résultat est illustré dans la figure (2) pris du travail de Keh et Weissmann dans le fer [Keh 1963]. Sur cette figure, on peut voir clairement que la relation de Taylor concorde bien avec les résultats à 25°C mais pas aux autres températures (-135 et -75°C).

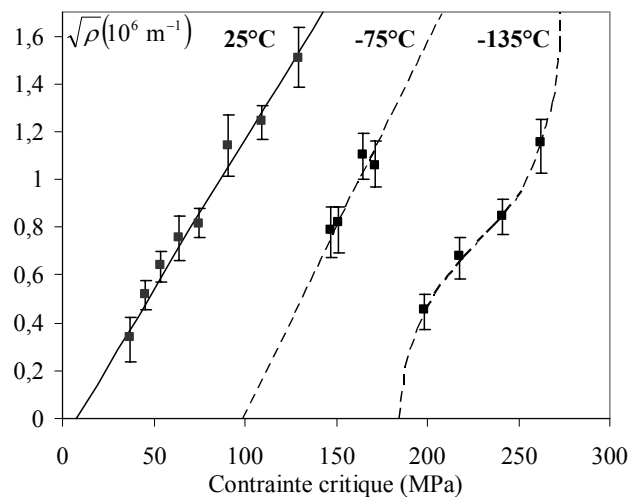


Figure 2 - Relation entre la racine carrée de la densité des dislocations et la contrainte d'écoulement plastique dans le fer pour trois températures [Keh 1963].

Une description « physiquement justifiée » du durcissement de la forêt à basse température doit, donc, en premier lieu être basée sur une compréhension du processus d'ancrage et de désancrage des jonctions entre dislocations vis. Dans la littérature, de telles analyses ont permis d'identifier deux mécanismes importants : (i) un mécanisme thermiquement activé traité dans le modèle de Louchet et *al.* [Louchet 1979] et (ii) un mécanisme athermique traité dans le modèle de Rauch [Rauch 1994]. Dans les paragraphes qui suivent, on détaillera ces deux modèles et on présentera brièvement le modèle de Tang et *al.* [Tang 1999] qui cherche à intégrer simultanément les deux mécanismes.

1.3.1- Modèle de Louchet, Kubin et Vesely

Dans ce modèle, l'interaction d'une dislocation vis avec la forêt est à l'origine d'un ancrage des dislocations mobiles sur des sections très courtes assimilées à des points. Conformément à des observations *in-situ* au MET, les sections vis entre points d'ancrage continuent de se déplacer tout en restant droites. Grâce à l'accumulation de doubles-décrochements aux points ancrés, le déplacement des sections vis crée alors des sections de caractère non-vis courbées. La configuration adoptée par les dislocations entre points d'ancrage dépend donc de la température ou de la vitesse de déformation via la mobilité des sections vis. Deux configurations limites sont ici distinguées suivant que la température est inférieure ou supérieure à une température de transition, notée T_c (figure (3)).

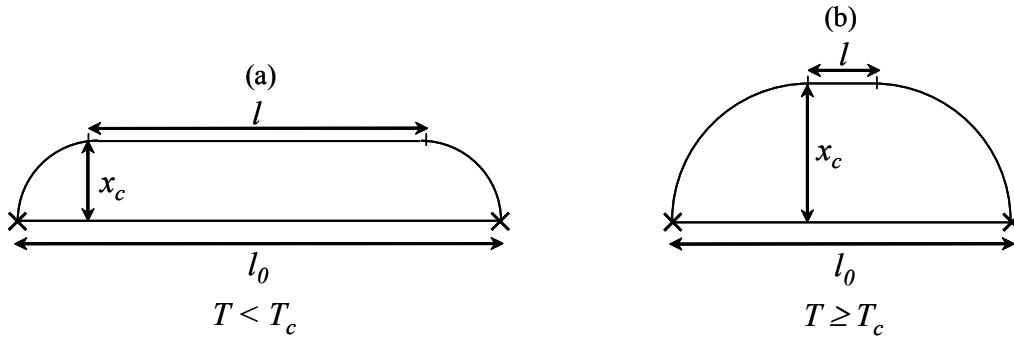


Figure 3 - Configurations critiques d'une dislocation vis en interaction avec des obstacles de la forêt, (a) à basse température ou forte contrainte, (b) à basse contrainte ou à une température supérieure à une température de transition T_c .

A basse température (figure (3-a)), la configuration critique de la libération de la dislocation est caractérisée par une distance critique, x_c , parcourue par la section vis au moment du franchissement des obstacles. En fonction des positions relatives des lignes de part et d'autre des points d'ancrage, la libération des dislocations va se faire, soit directement par le déplacement des sections vis, soit par une avancée des sections non-vis. Ces deux événements étant équiprobables, il a été montré que l'aire balayée par les sections vis est égale à l'aire balayée par les sections non-vis au cours de la déformation. Bien que les vitesses des lignes vis et non-vis soient très différentes, ce résultat essentiel permet alors de considérer que la vitesse de cisaillement des dislocations vis, $\dot{\gamma}_{vis}$ et celle des dislocations non-vis, $\dot{\gamma}_{non-vis}$ sont en moyenne identiques. De ce fait, la vitesse de cisaillement globale doit vérifier :

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_{vis} + \dot{\gamma}_{non-vis} = 2 \dot{\gamma}_{vis} \quad (4)$$

Ce premier résultat est important car il permet de relier le durcissement de la forêt à la mobilité des dislocations vis, via la relation d'Orowan. Afin de calculer $\dot{\gamma}_{vis}$, le désancrage des dislocations vis est une fois encore supposé se produire en moyenne après une distance critique parcourue notée, x_c .

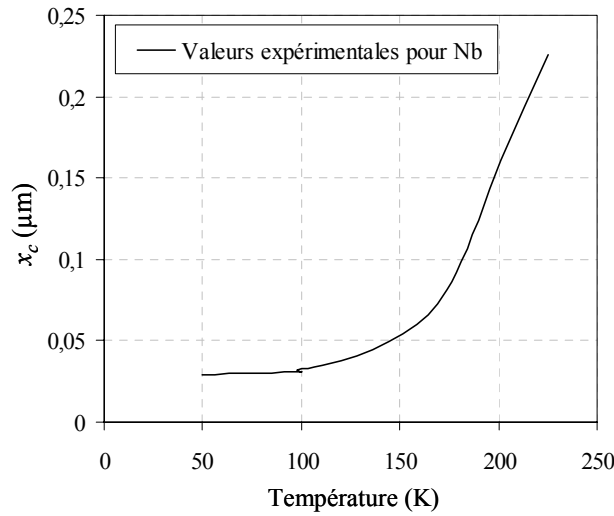


Figure 4 – Mesure de la variation de x_c en fonction de la température pour le niobium [Louchet 1979]. La température de transition athermique pour ce matériau est d'environ 230K.

Louchet et *al.* ont mesuré au MET la distance x_c dans le cas du niobium (figure (4)). Pour une densité de la forêt fixe, il a été montré que x_c varie peu aux plus faibles températures et croit rapidement à l'approche de la température T_a , la température de transition athermique. Cette identification de x_c est importante, car elle permet de calculer l'espacement statistique, l , entre points d'ancrage. En effet, dans le cas où $x_c \ll l$, alors $l \approx l_0$ et la surface moyenne balayée par une dislocation entre deux événements de désancrage-ancrage est lx_c . Par définition, cette surface est égale à l'inverse de la densité surfacique des obstacles de la forêt, ρ_f . Soit :

$$l = \frac{1}{\rho_f x_c} \quad (5)$$

La longueur moyenne des segments vis étant définie par l'équation (5), la vitesse moyenne de celle-ci doit être :

$$v = \frac{v_D b}{l_c^2} \frac{1}{\rho_f x_c} \exp\left(\frac{-\Delta G(\tau)}{kT}\right), \quad (6)$$

où, v_D est la fréquence de Debye, b , la norme du vecteur de Burgers, l_c , la longueur critique du double-décrochements et $\Delta G(\tau)$, la variation de l'énergie d'activation avec la contrainte.

D'après l'équation d'Orowan, on doit alors vérifier :

$$\dot{\gamma}_{vis} = \rho_{vis} \frac{v_D b^3}{l_c^2} \frac{1}{\rho_f x_c} \exp\left(\frac{-\Delta G(\tau)}{kT}\right), \quad (7)$$

ou encore d'après l'équation (4) :

$$\dot{\gamma} = 2A \frac{\rho_{vis}}{\rho_f} \frac{1}{x_c} \exp\left(\frac{-\Delta G(\tau)}{kT}\right), \quad (8)$$

avec $A = v_D b^3 / l_c^2$ une constante qui dépend du matériau. Connaissant la densité de la forêt, la densité des dislocations vis, la distance critique x_c , on peut finalement calculer $\Delta G(\tau)$ qui permet de déterminer la contrainte critique nécessaire pour passer au travers de la forêt à une vitesse de déformation imposée. Le durcissement ainsi mesuré pour différentes densités de la forêt est thermiquement activé. Cette dépendance en température est justifiée par une variation de la mobilité des sections vis puisque leur longueur est affectée par l'existence des obstacles de la forêt.

La deuxième partie du modèle Louchet *et al.*, consiste à calculer la température de transition T_c où les dislocations deviennent plus « flexibles » (figure (3-b)). T_c est associée au rapport entre la vitesse des dislocations vis et celle des dislocations non-vis. On définit, pour cela une seconde distance critique, x_s , reliée aux sections non-vis estimées de forme circulaire (figure (3-b)). La distance critique, x_s , peut être déterminée simplement d'après un calcul d'équilibre de tension de ligne. Elle est reliée à la contrainte appliquée à travers l'expression suivante :

$$\frac{x_s}{2} = \frac{\alpha \mu b}{\tau(T)}, \quad (9)$$

avec α est le coefficient de Taylor moyen (équation (1)).

Si l'on admet que la température de transition correspond à la configuration où la longueur des sections vis devient nulle, on trouve que :

$$x_s^2(T_c) \approx \frac{2}{\rho_f} \quad (10)$$

En résumé, l'approche de Louchet *et al.* permet de déterminer, avec les équations (9) et (10), la température critique marquant la frontière entre deux régimes de déformation. L'équation (8) permet de calculer le durcissement associé à une densité de la forêt, pourvu que la température reste inférieure à la température de transition. Le durcissement ainsi mesuré repose uniquement sur une variation de la mobilité des dislocations vis. Ce calcul nécessite au préalable une identification de la distance critique, x_c .

1.3.2- Modèle de Rauch

La configuration critique étudiée dans ce second modèle est identique à celle du modèle de Louchet *et al.* [Louchet 1979] (*cf.* paragraphe 1.3.1). Elle correspond à une section vis reliée à des sections non-vis formées par l'accumulation de doubles-décrochements et ancrées à des jonctions assimilées à des points (figure (5)).

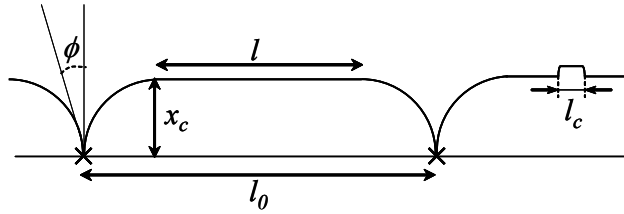


Figure 5 - Configuration critique de la dislocation vis entre les points d'ancrages.

Cependant, dans ce modèle, on suppose que la contrainte d'écoulement τ est la somme d'une contrainte effective, τ_{eff} nécessaire pour former les doubles-décrochements contrôlant le déplacement des sections vis et une contrainte interne, τ_i , due aux arbres de la forêt :

$$\tau = \tau_{eff} + \tau_i \quad (11)$$

Sous l'effet de la contrainte effective, des doubles-décrochements de longueur l_c , se forment et se propagent le long de la section vis de longueur l . La contrainte interne qui résulte de l'accumulation de ces doubles-décrochements correspond à une augmentation de l'énergie élastique dans le matériau, dW , pour un accroissement dl de la longueur de la ligne non-vis. Classiquement, cette énergie est reliée à un incrément de déformation $d\gamma$, d'après l'expression :

$$dW = \tau_i d\gamma \quad (12)$$

En considérant que l'énergie de ligne par unité de longueur vaut μb^2 , on doit vérifier que la contrainte interne doit satisfaire la relation :

$$\tau_i = \frac{dW}{d\gamma} = \frac{\mu b^2}{b dA}, \quad (13)$$

avec dA , l'aire balayée par la ligne durant le libre parcours des doubles-décrochements dans la direction l . Cette quantité est reliée à chaque avancée dl des sections vis par la relation :

$$\frac{dl}{dA} = \frac{\beta}{l_0}, \quad (14)$$

avec β , un coefficient traduisant la force moyenne des obstacles, relié à un angle critique de désancrage ϕ (équation (15)).

$$\beta = \frac{2 \cos \phi}{1 + \sin \phi} \left(1 + \frac{\tau_i}{\tau} \sin \phi \right) \quad (15)$$

L'expression (15) peut être simplifiée dans deux cas extrêmes : quand la contrainte effective est négligeable (c'est-à-dire prêt du régime athermique), le rapport τ_i/τ tend vers 1 et par conséquent, $\beta \approx 2 \cos \phi$. L'autre cas correspond au cas où τ_i/τ tend vers 0 (c'est-à-dire à très basse température). Dans ces conditions, si l'on suppose que l'angle ϕ de désancrage devient faible, on trouve à nouveau que $\beta \approx 2 \cos \phi$. Ainsi pour ces deux cas limites, on trouve un

comportement similaire à celui obtenu dans le régime athermique. Cependant, cette expression simplifiée n'est pas valable aux températures intermédiaires et l'équation (15) donnant β , va en pratique rendre compte d'une dépendance en température.

Afin de calculer la dépendance de la contrainte τ_i à la densité de la forêt, Rauch utilise la même approche que dans le modèle de Louchet *et al.* [Louchet 1979]. La longueur l_0 est calculée d'après la relation géométrique de l'équation (5). Mais la distance critique x_c est cette fois exprimée en fonction du rayon de courbure des sections non-vis ($R = \mu b / \tau$) supposées avoir la forme d'un arc de cercle :

$$x_c = \frac{\mu b}{\tau} (1 - \sin \phi) \quad (16)$$

On trouve finalement :

$$\tau_i = \beta \frac{\mu b}{l_0} = \frac{(\alpha \mu b)^2 \rho_f}{\tau}, \quad (17)$$

avec, $\alpha = \sqrt{\beta(1 - \sin \phi)}$ un coefficient proportionnel à la force des obstacles et fonction de la température.

Finalement, des équations (11) et (17), on déduit :

$$\tau = \frac{\tau_{eff}}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{\tau_{eff}^2 + 4(\alpha \mu b)^2 \rho_f} \quad (18)$$

Il faut noter que l'équation (18) peut être simplifiée dans deux cas extrêmes :

- aux températures élevées, un développement limité de τ_{eff} / τ au premier ordre conduit à :

$$\tau = \tau_{eff} + \alpha \mu b \sqrt{\rho_f} \quad (19)$$

Si on considère que dans ce cas, τ_{eff} est nulle, on retrouve bien l'expression de la variation de la contrainte avec la densité de la forêt trouvée dans le régime athermique (équation (1)).

- aux basses températures, un développement limité de τ_i / τ au premier ordre utilisant l'équation (17), donne :

$$\tau = \tau_{eff} + \frac{(\alpha \mu b)^2 \rho_f}{\tau_{eff}} \quad (20)$$

Dans ce cas, le modèle prédit une dépendance linéaire de la contrainte en fonction de la densité de la forêt.

En résumé, le modèle de Rauch est basé sur des considérations énergétiques valables à n'importe quelle température. La transition entre « basse » et « haute » température est

intégrée dans le modèle à travers une variation du coefficient α avec la température. Ce modèle ne tient pas compte de l'effet de la loi de mobilité des dislocations vis sur le durcissement. Il suppose que la courbure observée sur les sections non-vis est le bilan d'un équilibre entre la tension de ligne et la contrainte appliquée.

1.3.3- Modèle de Tang, Devincere et Kubin

Dans ce troisième modèle [Tang 1999], le durcissement dû aux arbres de la forêt est maintenant supposé contrôlé par deux mécanismes couplés : un effet de réduction de la longueur effective des sections vis et un effet de tension de ligne. La construction de ce modèle a été en grande partie guidée par les résultats des simulations de dynamique des dislocations [Tang 1998].

Dans ce modèle on admet, pour commencer (comme dans le modèle de Louchet et *al.* [Louchet 1979]), qu'en l'absence de la forêt, une dislocation droite vis de longueur l_0 se déplace avec une vitesse v donnée selon la formulation d'Arrhénius, fonction d'une contrainte effective τ^* , qui dans ce cas est strictement égale à la contrainte appliquée τ_0 :

$$v \propto l_0 \exp\left(\frac{-\Delta G(\tau_0)}{kT}\right) \quad (21)$$

Par contre, en présence d'une forêt, la contrainte effective contrôlant les déplacements des dislocations vis va être plus faible si ces dernières voient une force résistive induite par un ancrage de la forêt. La contrainte effective contrôlant la mobilité des dislocations devient alors la somme de la contrainte appliquée τ et d'une contrainte dite de tension de ligne, τ_{TL} . Si cette dernière contribution est faible devant la contrainte appliquée on peut alors écrire :

$$v \propto l_{eff} \exp\left(\frac{-\Delta G(\tau)}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\tau_{TL}}{S}\right), \quad (22)$$

avec, l_{eff} , la longueur effective des sections vis en présence de la forêt et S la sensibilité à la vitesse de déformation qui est fonction du volume d'activation associé à la formation d'un double-décrochements sur les sections vis :

$$S = \frac{kT}{V} = \frac{kT}{-\left(\frac{\partial \Delta G(\tau)}{\partial \tau}\right)} \quad (23)$$

Dans l'hypothèse d'une vitesse de déformation imposée, la différence des équations (21) et (22) donne:

$$\frac{\Delta G(\tau) - \Delta G(\tau_0)}{kT} = -\ln\left(\frac{l_0}{l}\right) - \frac{\tau_{TL}}{S} \quad (24)$$

De l'équation (24) on peut déduire le durcissement ($\Delta \tau = \tau - \tau_0$) :

$$\Delta\tau = S_0 \ln\left(\frac{l_0}{l}\right) + \tau_{TL} \quad (25)$$

On notera que pour arriver à cette expression, il faut supposer que la différence entre S (sensibilité à la vitesse en présence de forêt) et S_0 (sensibilité à la vitesse à l'état de référence) est négligeable.

Pour définir la contrainte résistive τ_{TL} , sur les sections vis de la ligne, Tang et *al.* utilisent une formule développée par Devincré et Condat [Devincré 1992] pour calculer les forces de rappel à travers un modèle discret de la ligne de la dislocation construite uniquement avec des segments de caractère vis et coin :

$$\tau_{TL} = C \frac{\mu b}{l}, \quad (26)$$

où :

$$C = \frac{1}{4\pi(1-\nu)} \left[\ln\left(\frac{2x_1}{b}\right) + \ln\left(\frac{2x_2}{b}\right) + \frac{3-2\nu}{2(1-\nu)} \right] \quad (27)$$

Les distances x_1 et x_2 sont liées à la configuration géométrique de la ligne et présentent les longueurs de segments coins voisins d'un segment vis. En moyenne, Tang et *al.* ont vérifié que dans leur simulations, $x_1 = x_2 = x_c / 2$ avec x_c est une fois encore défini comme le déplacement moyen des segments vis à la position critique de désancrage des arbres de la forêt.

Finalement, avec l'aide de la relation géométrique ($lx_c = 1/\rho_f$), Tang et *al.* proposent un durcissement de la forêt de la forme :

$$\Delta\tau = S_0 \ln\left(\frac{\rho_f}{\rho_{f0}}\right) + C\mu \frac{\mu\rho_f}{\tau_0\rho_0}, \quad (28)$$

où ρ_f est la densité de la forêt et ρ_0 une densité de référence vérifiant :

$$\rho_0 = \frac{1}{\beta b^2}, \quad \beta = \frac{\tau_0 x_c}{\mu b} \quad \text{et} \quad \rho_{f0} = \frac{b\tau_0\rho_0}{\mu l_0} \quad (29)$$

Le durcissement ainsi obtenu correspond à une combinaison de deux contributions : (i) un terme logarithmique qui résulte de la relation entre la vitesse des dislocations vis et leur longueur. Ce terme est proche de celui trouvé dans le modèle de Louchet et *al.* [Louchet 1979] ; (ii) une contribution linéaire de la tension de ligne proche de celle trouvée dans le modèle de Rauch [Rauch 1994].

En résumé, le modèle de Tang et *al.* est basé sur une loi de mobilité des dislocations vis similaire à celle intervenant dans le modèle de Louchet et *al.*, mais cette fois-ci on prend en compte une contrainte effective qui est une superposition de la contrainte nécessaire pour vaincre la friction du réseau et une contrainte de rappel assimilable à une tension de ligne (il serait plus exacte de parler de self-contrainte telle qu'elle est définie par Brown [Brown

1971]). De cette façon, on inclut dans le durcissement simultanément un effet de longueur et un effet de tension de ligne. Pour finir on retiendra que la distance critique moyenne, x_c , parcourue par la dislocation vis avant désancrage doit aussi être obtenue par l'expérience ou à travers les simulations.

2- Simulations du durcissement dans le régime thermique

Afin d'analyser le durcissement dû aux interactions entre dislocations dans le régime thermique, des simulations de l'écrouissage latent ont été effectuées. Comme la microstructure des dislocations à basse température est essentiellement formée de dislocations vis, on s'est intéressé uniquement au cas de l'interaction entre dislocation vis d'un système mobile avec une forêt de dislocations de même caractère. Un seul type de forêt a été étudié, il correspond à la jonction la plus forte de type mixte symétrique (*cf.* tableaux (1), (2) et (3)).

Le but de ces simulations est d'un côté, de mettre en évidence le rôle de la température et l'effet de la densité de la forêt sur le durcissement à basse température. Et d'un autre côté, de vérifier le modèle de prédiction du durcissement développé pour l'interaction des dislocations avec les carbures dans le cas d'un ancrage plus faible (cas des interactions avec la forêt).

Avant de présenter les résultats des simulations, il est important de mettre l'accent sur un problème technique rencontré durant cette étude et qui ne s'était pas posé dans le cas du durcissement par les carbures. Lorsque deux dislocations interagissent à courte distance, celles-ci voient un gradient de contrainte interne fort qui modifie localement la contrainte effective vue par les dislocations près de leur point de contact (dans le code microMegas ces situations sont désignées comme des puits de forces). A vitesse de déformation imposée, cette variation forte de la contrainte va générer localement une rugosité le long des lignes qui va s'éliminer rapidement par le déplacement de super-crans le long des directions vis. La résolution numérique de la dynamique de ces super-crans est complexe et nécessite entre autres, l'utilisation de pas de temps beaucoup plus petits que lors des simulations avec les carbures. Ce problème est bien entendu accentué par le fait que la vitesse des dislocations dans le régime thermique varie exponentiellement avec la contrainte effective. Pour remédier à ce problème, un paramètre important de la simulation doit être examiné. Il s'agit du module élastique apparent, G utilisé pour contrôler le chargement et imposer une vitesse de déformation constante durant les simulations. Lors des calculs du durcissement de la forêt, il a fallu utiliser un module G très grand (~ 10 fois le module d'Young) pour donner à la simulation la possibilité de réagir à des variations rapides de la vitesse de déformation plastique. Cette procédure explique les fluctuations importantes visibles sur les courbes de contrainte-déformation simulées qu'on verra dans la suite de ce chapitre (figure (10)).

2.1- Conditions des simulations

La méthodologie utilisée pour les simulations de la dynamique d'une dislocation infinie en interaction avec une distribution aléatoire de carbures définie dans le chapitre IV est de nouveau appliquée. Mais cette fois, on considère quatre dislocations vis infinies régulièrement espacées, en interaction avec une distribution aléatoire de dislocations forêt de caractère vis. Les dislocations mobiles appartiennent au système de glissement noté 1 dans le tableau (1) et les dislocations de la forêt appartiennent aux systèmes 4 et 11. La taille de la boîte de simulation est de $5 \times 5 \times 5 \text{ (}\mu\text{m)}^3$, ce qui veut dire que la longueur initiale des dislocations vis du système mobile est de $l_0 = 8,7 \text{ }\mu\text{m}$. La longueur des dislocations de la forêt est de $5 \text{ }\mu\text{m}$. Les simulations sont réalisées en imposant une vitesse de déformation $\dot{\gamma}$ constante. Pour chaque simulation, la valeur de $\dot{\gamma}$ est initialement fixée à travers l'équation d'Orowan, c'est à dire que $\dot{\gamma}$ est fonction de la densité des dislocations mobiles ($6,9 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-2}$), de la taille du volume simulé et d'une vitesse moyenne des dislocations mobiles fixée à $1 \text{ }\mu\text{m/s}$ pour tous les calculs. Trois densités de la forêt sont étudiées : $3 \cdot 10^{12}$, $6 \cdot 10^{12}$ et $12 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$. Ces densités sont réparties de manière égale entre les deux systèmes de la forêt.

2.2- Résultats des simulations

2.2.1- Microstructures des dislocations

Avant de quantifier le durcissement simulé, il semble intéressant de discuter les microstructures des dislocations simulées à différentes températures. Sur la figure (6), on présente quatre exemples de microstructures montrant la morphologie adoptée par les lignes des dislocations vis lors de l'ancrage par la forêt. Ces microstructures sont comparées entre 50 et 250 K et pour des densités de la forêt de $3 \cdot 10^{12}$ et $12 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$.

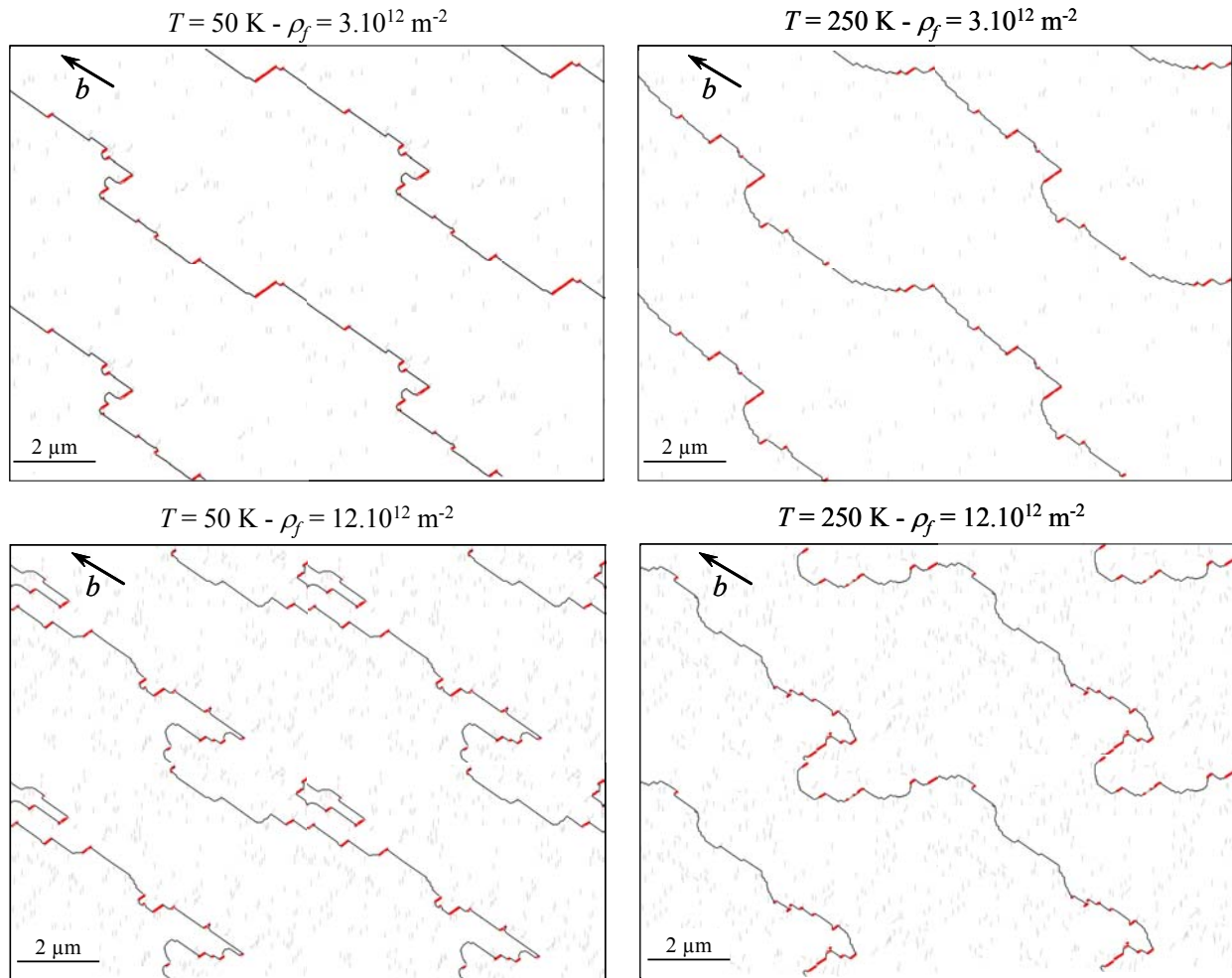


Figure 6 - Microstructures des dislocations vues normalement au plan de glissement des dislocations du système mobile, 1, pour deux densités de la forêt, 3.10^{12} et $12.10^{12} \text{ m}^{-2}$ et pour deux températures limites, 50 et 250 K. Le système mobile est présenté en noir, la forêt en gris et les jonctions en rouge. On notera sur ces images la présence de conditions aux limites périodiques appliquées au bord du volume.

Quelque soit la densité de la forêt considérée, à 50 K les dislocations vis restent droites et ne se courbent que très peu lors du franchissement des obstacles. Ceci est que ce soit lors de la phase de formation ou de destruction des jonctions. En revanche, à 250 K, les sections de dislocations entre jonctions sont, en grande partie, courbées et cette courbure est de plus en plus marquée lorsque l'on augmente la densité de la forêt. Toutes les observations faites sont donc consistantes avec celles déjà réalisées dans le chapitre IV dans le cas de l'interaction d'une dislocation infinie avec une distribution de carbures.

Maintenant, si l'on regarde la microstructure à une échelle plus fine pour étudier la forme des lignes des dislocations autour des jonctions, de nouvelles informations sont cette fois-ci apportées par les simulations. Contrairement à la forme « symétrique » des jonctions, observée dans le régime athermique et schématisée dans la figure (1), durant les simulations de la dynamique des dislocations dans le régime thermique, les jonctions formées entre une ligne de dislocation mobile et une ligne de la forêt sont très asymétriques. Comme illustré sur

la figure (7), cette asymétrie résulte des forces s'exerçant aux nœuds triples des jonctions. En effet, durant la formation d'une jonction, un des points triples va aider un côté de la ligne mobile à se déplacer, tandis que l'autre point triple veut faire reculer la seconde partie de la dislocation. Avec une loi de mobilité des dislocations thermiquement activée où la contrainte effective intervient sur la vitesse de façon exponentielle, ce bilan de forces de chaque côté des jonctions revient à immobiliser une des sections de la dislocation mobile et à déplacer très rapidement l'autre côté en utilisant la force motrice donnée par la formation de la jonction. Cette observation devrait être rapprochée des mesures rapportées au paragraphe suivant où l'on verra que la taille moyenne des jonctions trouvée dans la microstructure ne varie quasiment pas avec la température et la densité de la forêt. Comme le montre schématiquement la figure (7), la longueur des jonctions est finalement pour l'essentiel, contrôlée par la courbure que doit prendre très rapidement une des deux sections de la dislocation forêt pour construire la jonction (le zippage des jonctions est un processus très rapide). Faute de temps, ce mécanisme intéressant n'a pas pu être étudié en détail, mais il nécessiterait sûrement une étude plus approfondie.

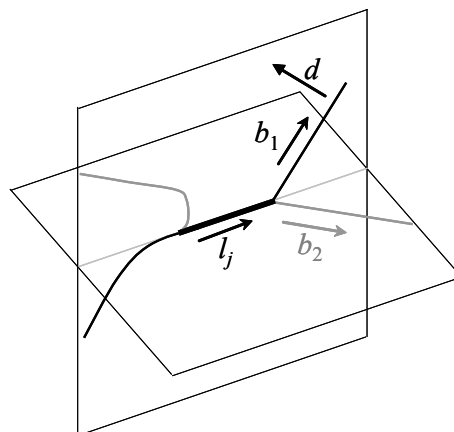


Figure 7 - Jonction asymétrique dans le régime thermique, en contraste avec la jonction symétrique dans le régime athermique (figure (1)). Le vecteur d désigne le sens du déplacement de la dislocation mobile.

Par ailleurs, nous avons pu identifier à travers les simulations deux mécanismes de franchissement des jonctions. Dans la mesure où la vitesse des dislocations vis dépend étroitement de leur longueur, lorsqu'une jonction est formée et donc que la ligne initiale mobile est coupée en deux, une des deux sections va nécessairement pouvoir avancer plus vite que l'autre. Ces deux mécanismes sont bien sûr indépendants de la phase rapide de formation de la jonction et sont statistiquement équiprobables. Le détail de ces deux mécanismes est illustré dans les figures (8) et (9).

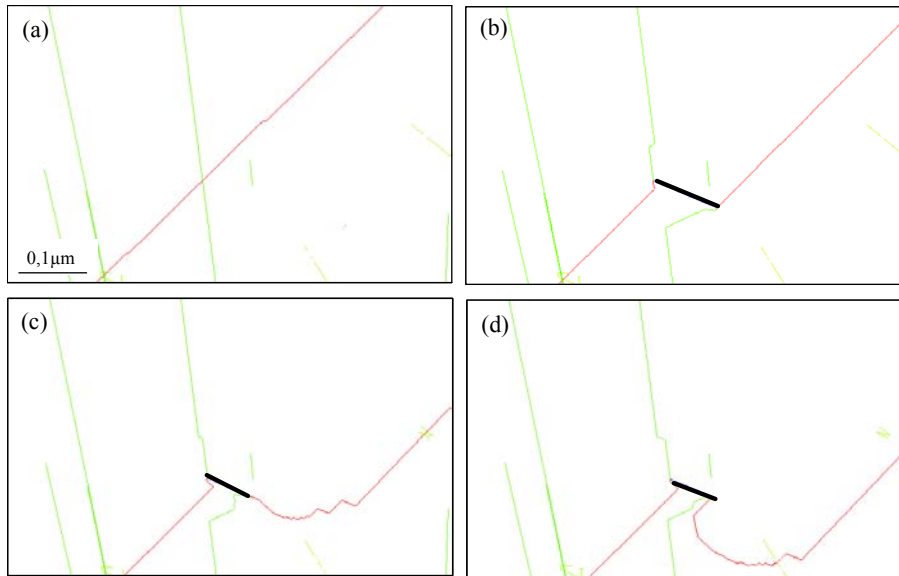


Figure 8 - Illustration du franchissement d'une jonction lorsque le bras de la jonction le plus mobile se trouve être du côté assisté lors de la première phase de la formation de la jonction.

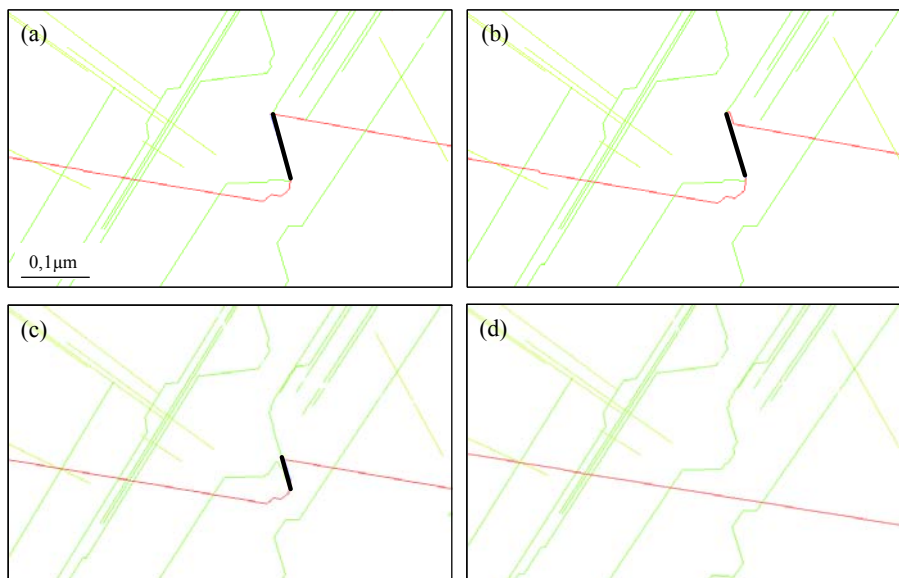


Figure 9 - Illustration du franchissement d'une jonction lorsque le bras de la jonction le plus mobile se trouve être du côté immobilisé lors de la première phase de formation de la jonction.

2.2.2- Analyse quantitative des jonctions

Dans cette partie, on va analyser les jonctions observées dans les microstructures de dislocations simulées (figure 6) à travers deux quantités importantes : le nombre de jonctions noté à une déformation donnée et la longueur moyenne des jonctions.

- Nombre de jonctions :

Le tableau (4) rassemble le nombre de jonctions déterminé à une même déformation ($\gamma = 4.10^{-3}$) pour les trois densités de la forêt et les quatre températures simulées. Comme on peut le remarquer, pour une même densité de la forêt, le nombre de jonctions est indépendant de la température. Ce résultat valide l'idée que la formation des jonctions résulte d'une contrainte locale très forte qui, près du point de contact, est toujours plus grande que la contrainte appliquée. Logiquement on vérifie aussi que le nombre de jonctions augmente lorsque la densité de la forêt croît.

	50 K	100 K	150 K	250 K
3.10^{12} m^{-2}	29	26	27	28
6.10^{12} m^{-2}	48	50	47	49
$12.10^{12} \text{ m}^{-2}$	79	78	81	84

Tableau 4 - Nombre de jonctions noté à $\gamma = 4.10^{-3}$ en fonction de la densité de la forêt et de la température

- Longueur des jonctions :

La longueur moyenne des jonctions, L_j , peut être calculée à travers la densité de jonctions, ρ_j et le nombre de jonctions, N_j calculé dans microMegs à chaque pas de la simulation et pour chaque système de glissement (équation (30)) :

$$L_j = \frac{\rho_j V}{N_j} \quad (30)$$

Pour les trois densités de la forêt et les quatre températures testées, les longueurs des jonctions ainsi calculées définissent des moyennes regroupées dans le tableau (5).

	50 K	100 K	150 K	250 K
3.10^{12} m^{-2}	$0,12 \pm 0,01$	$0,11 \pm 0,01$	$0,11 \pm 0,05$	$0,10 \pm 0,05$
6.10^{12} m^{-2}	$0,10 \pm 0,01$	$0,12 \pm 0,05$	$0,11 \pm 0,05$	$0,11 \pm 0,05$
$12.10^{12} \text{ m}^{-2}$	$0,12 \pm 0,05$	$0,11 \pm 0,10$	$0,12 \pm 0,05$	$0,10 \pm 0,05$

Tableau 5 - Longueurs moyennes des jonctions (en μm) calculées à la fin de déformation en fonction de la densité de la forêt et de la température.

Comme on peut le voir, la longueur de jonctions est quasi constante, indépendante de la température et indépendante de la densité de la forêt. Ce calcul surprenant est bien confirmé par les observations des microstructures (cf. figure (6)). L'origine de ce phénomène est sans doute à rapprocher de la différence importante de cinétique existant entre l'étape initiale rapide de formation des jonctions et le processus lent de leur destruction. Dans la suite de cette étude, on va considérer L_j constante et égale à $0,11 \mu\text{m}$.

2.2.3- Détermination du durcissement

La figure (10) présente un exemple de courbes de traction obtenues lors de nos simulations en présence d'une forêt de $12 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$ et pour les quatre températures testées. Sur cette figure, on voit les fluctuations importantes de la contrainte expliquées plus haut et résultant de la valeur élevée de module G considéré dans ces simulations. Les plateaux au début de la déformation présentent le niveau de contrainte obtenu dans le cas d'un essai de déformation réalisé sans la forêt. Les lignes tracées en pointillés correspondent aux niveaux de contraintes relevées en présence de la forêt. Ces lignes ont été tracées en considérant la valeur moyenne des plus fortes valeurs de la contrainte atteintes en cours de la simulation (valeurs en crête). On voit immédiatement que le durcissement de la forêt décroît lorsque la température baisse.

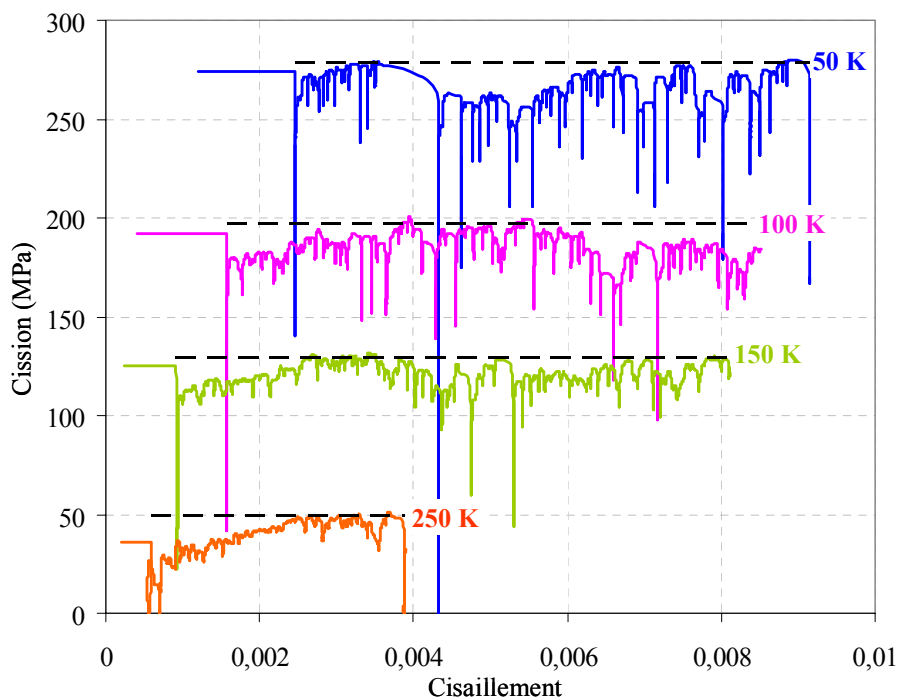


Figure 10 - Exemple de courbes de déformation en fonction de la température obtenues pour une densité de la forêt de $12 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$. Le premier plateau au début de la déformation présente la cission critique en absence de la forêt et les lignes en pointillés correspondent au niveau moyen des contraintes en crête.

Pour quantifier le durcissement, on fait appel à la relation:

$$\Delta \tau_f = \tau_c (\text{avec forêt}) - \tau_c (\text{sans forêt}) \quad (31)$$

L'ensemble des résultats des simulations est reproduit dans le tableau (6) et porté sur les figures (11-a) et (11-b) pour illustrer respectivement la sensibilité à la température et à la densité de la forêt. Pour des raisons de visibilité, les barres d'erreurs sur les valeurs de durcissement ne sont pas présentées sur ces figures. Elles seront présentées plus loin dans le cadre des comparaisons entre simulations et modèles de durcissement.

	50 K	100 K	150 K	250 K
3.10^{12} m^{-2}	$1,05 \pm 0,5$	$3,51 \pm 2,5$	$4,02 \pm 2,0$	$7,06 \pm 2,1$
6.10^{12} m^{-2}	$3,20 \pm 0,8$	$6,05 \pm 1,1$	$7,00 \pm 2,0$	$9,46 \pm 2,8$
$12.10^{12} \text{ m}^{-2}$	$4,42 \pm 1,4$	$6,51 \pm 2,0$	$8,02 \pm 1,5$	$12,66 \pm 2,1$

Tableau 6 - Valeurs du durcissement (en MPa), obtenues avec la simulation en fonction de la température et de la densité de la forêt

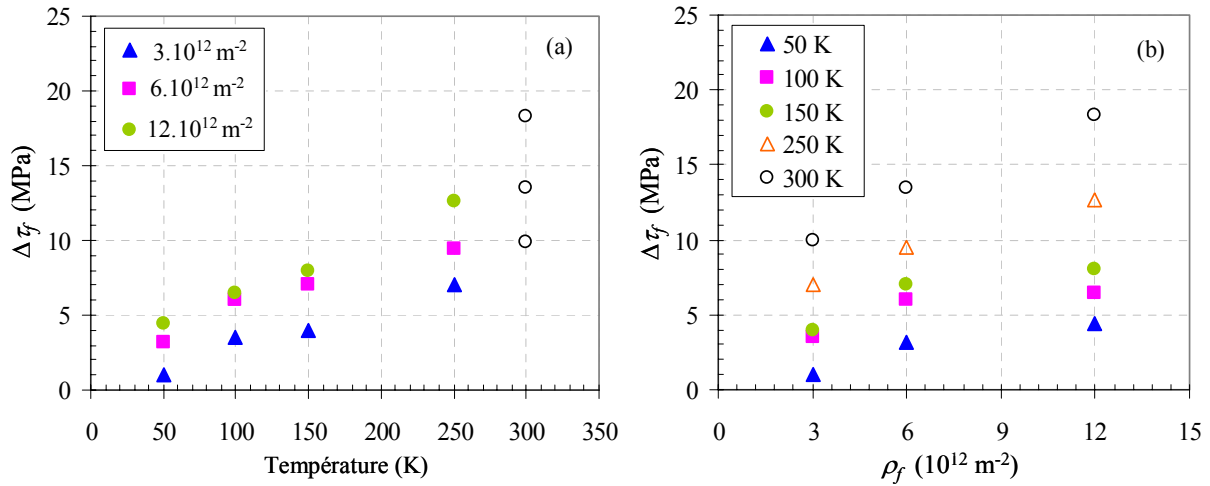


Figure 11 - Durcissement obtenu avec la simulation en fonction de la température et en fonction de la densité de forêt. Les points à 300 K correspondent aux résultats des simulations DD effectuées dans le régime athermique [Queyreau 2008].

A travers cette figure, on voit simplement que, d'un côté, pour une densité de la forêt fixe, le durcissement augmente avec la température. D'un autre côté, comme dans le cas du durcissement mesuré dans le régime athermique (les points à 300 K), à une température constante, le durcissement augmente quand la densité de forêt augmente. On vérifiera à la fin de ce chapitre si cette variation est linéaire avec la racine carré de la densité de la forêt comme dans le régime athermique.

La comparaison entre les résultats de ces simulations de la forêt avec ceux du chapitre précédant pour le durcissement par des carbures montre que les taux de durcissement obtenu ici sont beaucoup plus faibles. Cependant les tendances de variation avec la température et avec la densité des obstacles sont toutes identiques. De ce fait, il semble intéressant de tester si le modèle de durcissement que nous avons développé précédemment peut s'appliquer encore moyennant quelques modifications.

3- Prédiction du durcissement

3.1- Analyse géométrique

Avant de présenter les détails du modèle, on s'est intéressé tout d'abord à vérifier l'équation géométrique essentielle qui intervient systématiquement dans le calcul de la longueur des sections vis dans les modèles analytiques, c'est-à-dire :

$$l = \frac{1}{\rho_f x_c} \quad (32)$$

Si l'on suppose que les lieux d'ancrage que représentent les jonctions sont répartis régulièrement, la microstructure des dislocations observée lors des simulations aux plus basses températures peut être schématisée comme sur la figure (12-a).

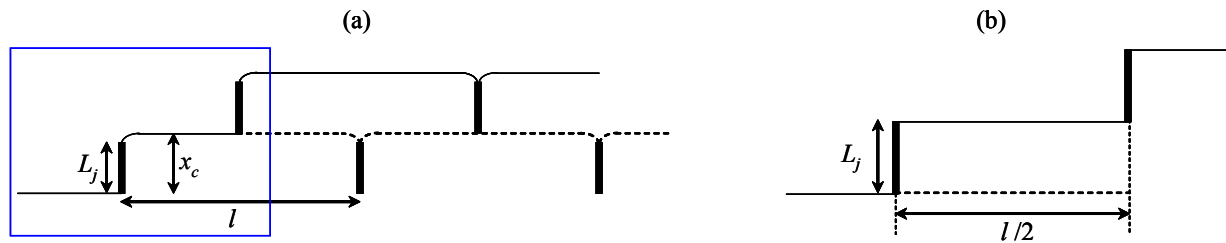


Figure 12 - (a) Configuration schématique d'une ligne de dislocation ancrée par des jonctions. Les jonctions sont présentées en trait gras. (b) Approximation du motif de la ligne encadré dans la figure (a) en supposant que la hauteur critique x_c n'est pas très différente de L_j

Comme on peut le vérifier sur la figure (6), à basse température (50 K), la courbure des sections non-vis accumulée près des jonctions est toujours très petite. De ce fait, on peut considérer dans de telles microstructures que $x_c \approx L_j$. A partir du motif élémentaire de la figure (12-b), on peut déterminer directement de la simulation la longueur $l/2$ séparant deux jonctions à travers la relation suivante :

$$\frac{l}{2} = \frac{(\rho V - N_j L_j)}{N_j}, \quad (33)$$

où ρ est la densité du système mobile, V le volume de simulation, N_j le nombre de jonctions et L_j la taille moyenne des jonctions. Bien que ρ et N_j varient continûment dans toutes les simulations, on voit sur la figure (13-a) que la quantité $l/2$ est constante au cours de la déformation lorsque la densité de la forêt est constante. L'ensemble des mesures de $l/2$ réalisées en fonction de la température et en fonction de la densité de la forêt sont regroupées sur la figure (13-b).

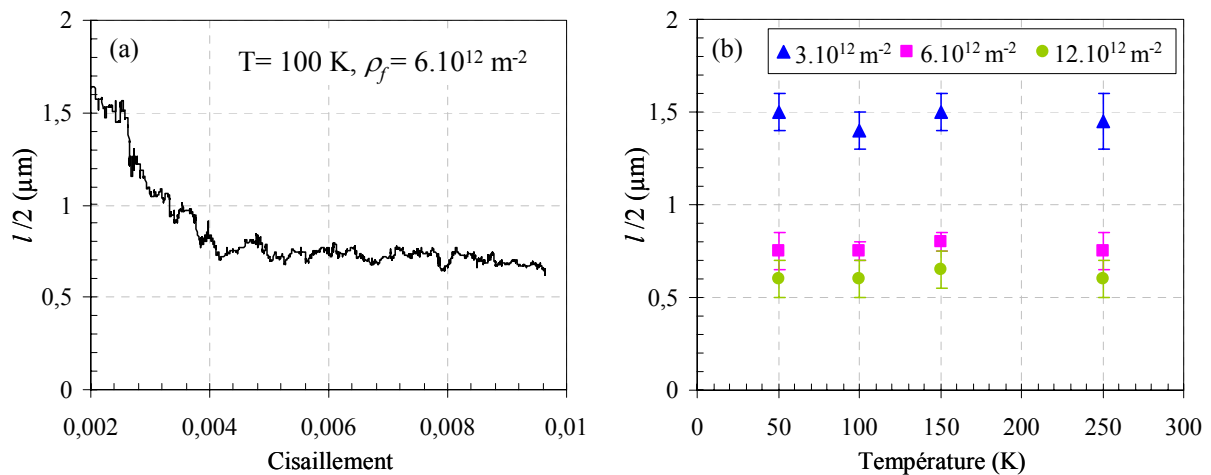


Figure 13 - Variation de $l/2$ au cours de la déformation pour $T= 100 \text{ K}$ et $\rho_f= 6.10^{12} \text{ m}^{-2}$. (b) Variation de moyenne des $l/2$ relevée en fonction de la température pour les trois densités de la forêt testées.

Cette longueur $l/2$ calculée, on peut vérifier si la relation reliant l'aire balayée entre points d'ancrage à la densité de la forêt est vérifiée avec nos simulations. Pour le faire, on décide de calculer une densité de la forêt effective (ρ_f^*) vérifiant l'équation (32) et de comparer cette quantité avec la densité vraie de la forêt définie pour chaque simulation. Comme illustré sur la figure (14-a), il faut d'abord noter que la quantité ρ_f^* mesurée en continu lors des simulations ne varie pas beaucoup au cours de la déformation. ρ_f^* est donc bien une quantité robuste caractérisant notre système physique simulé. L'ensemble des résultats obtenus pour cette quantité sont rassemblés dans la figure (14-b).

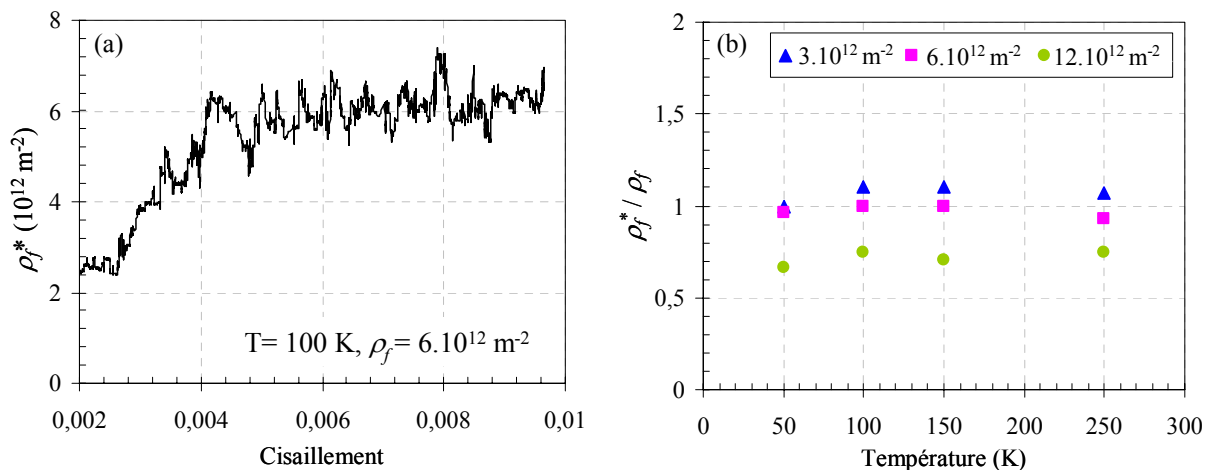


Figure 14 - (a) Variation de ρ_f^* au cours de la déformation pour $T= 100 \text{ K}$ et $\rho_f= 6.10^{12} \text{ m}^{-2}$. (b) Variation du rapport ρ_f^*/ρ_f avec la température pour toutes les densités de la forêt considérées. Les barres d'erreurs ne sont pas présentées pour des raisons de visibilité, mais celles-ci sont toujours faibles.

Comme on peut le constater sur la figure (14-b), pour les deux plus faibles densités ($3 \cdot 10^{12}$ et $6 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$), le rapport ρ_f^*/ρ_f ne s'éloigne jamais de l'unité. Les résultats de nos simulations constituent donc une validation de l'équation (32) et surtout montrent que cette équation géométrique est vérifiée quelque soit l'écart de vitesse entre les dislocations vis et les dislocations non-vis qui change beaucoup avec la température. Par contre, pour la plus forte densité, $12 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$, on voit que le rapport ρ_f^*/ρ_f décroît. Cette diminution signifie qu'une partie des arbres de la forêt n'intervient pas lors de l'ancrage des dislocations du système mobile. On peut logiquement imaginer que les arbres répulsifs, au delà d'une densité, ne sont plus des obstacles suffisants pour retenir une dislocation. Cette observation est alors conforme avec le fait qu'au delà de la température athermique, seuls les arbres attractifs de la forêt participent au durcissement.

3.2- Modèle de prédiction du durcissement

Pour transposer le modèle du chapitre IV au cas de la forêt, le nouveau mécanisme à considérer est que la force des jonctions n'est plus infinie, mais que celles-ci sont détruites avant d'être contournées comme dans le cas des particules. Afin de décrire simplement ce mécanisme, nous allons comme dans le modèle de Rauch [Rauch 1994], décrire l'ancrage des jonctions par un modèle ponctuel et un angle critique de destruction θ . Mais ici pour être en accord avec les observations faites lors des simulations, nous allons supposer que cet angle critique est une constante du matériau, indépendante de la température, et nous allons faire apparaître explicitement la longueur de jonctions dans le calcul de l'aire balayée par les vis. Les paramètres géométriques du modèle sont résumés sur la figure (15).

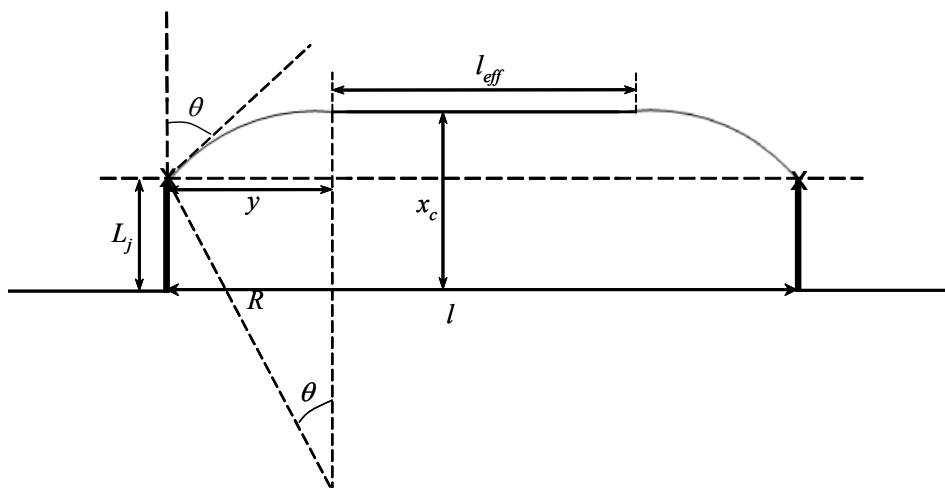


Figure 15 - Configuration du modèle de la ligne de la dislocation entre les points d'ancrage

Dans le schéma de la figure (15), l'angle θ est un angle critique qui rend compte de la résistance moyenne de la forêt. Il est constant et défini d'après la valeur du coefficient de Taylor, α , calculé en régime athermique ($\theta \approx 70^\circ$). La distance x_c correspond à la distance

moyenne parcourue par les sections vis avant destruction d'une jonction. Le rayon R correspond au rayon de courbure des sections non-vis. L est la distance entre points d'ancrage et l_{eff} correspond à la longueur restante de la section vis à la configuration critique. Ces quantités sont reliées entre elles par des relations géométriques, définies dans le modèle de Rauch [Rauch 1994].

Afin d'appliquer le modèle de prédiction de durcissement développé dans le cas des carbures, on a besoin de déterminer la longueur effective des sections vis, l_{eff} . Pour le faire, on va tout d'abord déterminer le rayon de courbure des sections non-vis, R .

- Détermination du rayon R

Rappelons que d'après les hypothèses faites dans le cas des carbures, le rayon de courbure des sections non-vis résulte de la différence de mobilités entre les dislocations vis et les dislocations non-vis. R est alors fonction de la quantité $\Delta\tau_{coin}$ qui est la différence entre la contrainte nécessaire à une dislocation vis et celle nécessaire à une dislocation non-vis pour se déplacer à une même vitesse imposée. Comme on l'a déjà vu, cette quantité dépend de la température et surtout de la longueur de la dislocation vis. Dans le cas de la forêt, la longueur vis en première approximation va être la distance entre les points d'ancrage et nous avons vu au paragraphe précédent que cette quantité peut être estimée à travers la relation : $l = 1/L_j \rho_f$ (équation (32)). Une évaluation de $\Delta\tau_{coin}$ peut donc être faite à toute température d'après la formule :

$$\Delta\tau_{coin} = \tau_0 \frac{kT}{\Delta H_0} \ln\left(\frac{Kv_0}{H(1/L_j \rho_f)}\right) \left(2 + \frac{kT}{\Delta H_0} \ln\left(\frac{v^2}{H(1/L_j \rho_f)Kv_0}\right)\right) \quad (34)$$

et R est le rayon de courbure nécessaire à la tension de ligne pour équilibrer la contrainte $\Delta\tau_{coin}$:

$$R = \frac{T_L}{b\Delta\tau_{coin}} \quad (35)$$

Afin de calculer R , une approximation simple de la tension de ligne ($T_L = \mu b^2$) peut être utilisée comme au chapitre précédent, mais ici pour simplifier la comparaison avec d'autres modèles du durcissement dans le régime athermique, l'équation (36) plus exacte a été préférée pour définir la tension de ligne :

$$T_L = \frac{\mu b^2}{4\pi} \left(\frac{1-2\nu}{1-\nu}\right) \ln\left(\frac{\rho_f^{-1/2}}{b}\right) \quad (36)$$

Dans la figure (16), on représente la variation de $\Delta\tau_{coin}$ et de R en fonction de la température. A une même température, $\Delta\tau_{coin}$ augmente quand la densité de la forêt augmente puisque la longueur l diminue. Cet effet induit une diminution du rayon R quand la densité de la forêt augmente. Ce résultat, qui n'est pas intuitif, peut être vérifié directement sur les

microstructures simulées (figure (6)). Plus généralement, on note, que R varie peu entre 50 et 150 K et n'est pas beaucoup plus grand que la longueur moyenne des jonctions.

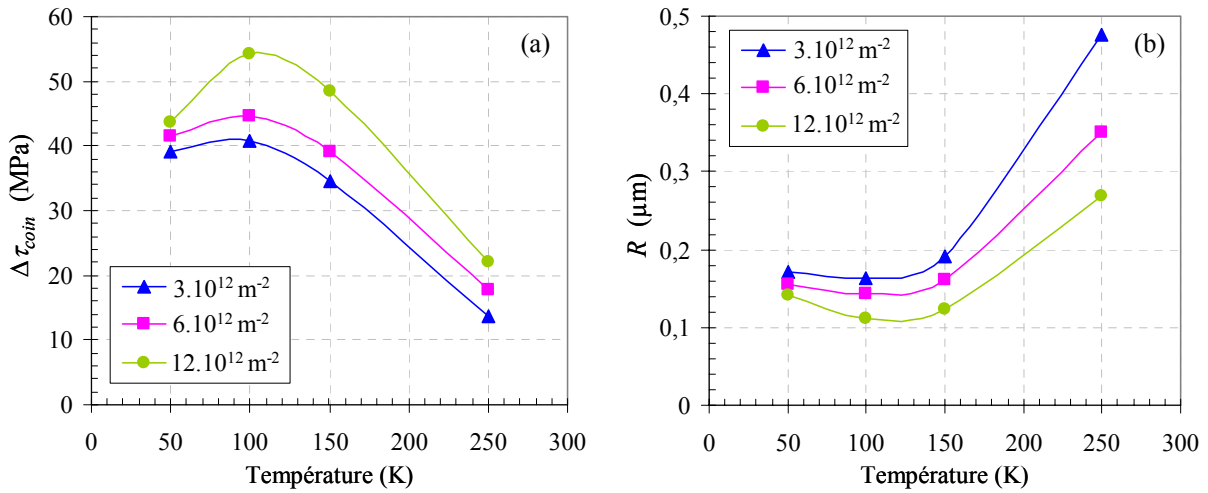


Figure 16 - (a) Variation de $\Delta\tau_{\text{coin}}$, (b) Variation de R , avec la température pour les trois densités de la forêt considérées

Le rayon de courbure des sections non-vis connu, on calcule exactement la longueur effective des sections vis, l_{eff} contrôlant la mobilité.

- Détermination de l_{eff} :

A cette étape, on utilise des formules géométriques simples similaires à celles du modèle de Rauch [Rauch 1994]. Cependant, comme illustré sur le schéma de la figure (15), on décide d'inclure dans la hauteur critique x_c , la longueur moyenne des jonctions. En effet, celles-ci sont dans la microstructure quasiment normales à la direction vis et toujours beaucoup plus grandes que la hauteur des sections non-vis projetées dans la direction coin, ($R(1-\sin\theta)$). De plus, l'analyse de la dynamique des dislocations à toutes les températures montre clairement que la formation des jonctions participe activement au déplacement des dislocations vis et donc leur longueurs doivent être incluses dans l'aire balayée par les dislocations vis. On vérifie aisément que :

$$l_{\text{eff}} = l - 2y, \quad (37)$$

avec :

$$l = \frac{1}{\rho_f x_c} \quad (38)$$

$$x_c = L_j + R(1 - \sin\theta) \approx L_j \quad (39)$$

$$y = R \cos\theta \quad (40)$$

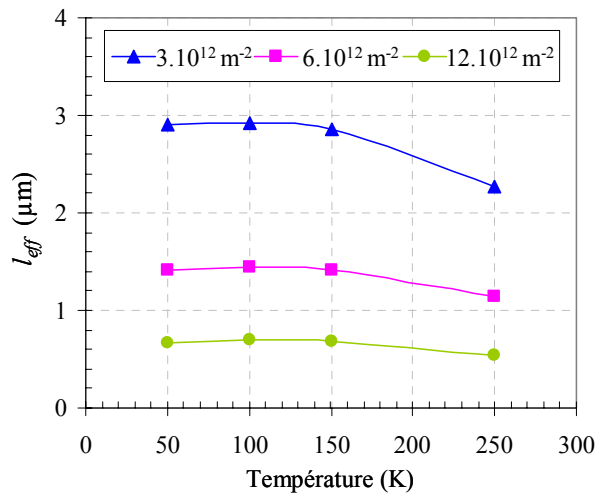


Figure 17 - Variation de la longueur effective l_{eff} des sections vis mobiles, déterminée en fonction de la température et de la densité de la forêt.

Sur la figure (17), les solutions de l'équation (37) sont tracées en fonction de la température et pour les trois densités de la forêt. On note tout d'abord qu'à température fixe, l_{eff} diminue de manière inversement proportionnelle à l'augmentation de la densité de la forêt. Cette relation de proportionnalité doit beaucoup à l'équation (38) qui montre que l'essentiel du déplacement des sections vis se fait lors de la formation des jonctions ($x_c \approx L_j$). Ensuite, pour une densité de la forêt fixée, l_{eff} ne varie presque pas entre 50 et 150 K et décroît de manière significative seulement à 250 K. En effet, à 250 K l'écart entre la mobilité des vis et celle des non-vis n'est plus important et donc le rayon de courbure R des sections non-vis augmente beaucoup. Dans tous les cas, la longueur effective déterminée à partir de l'équation (37) a été trouvée en bon accord avec les longueurs des sections vis mesurées dans les microstructures des dislocations simulées (figure (6)).

- Calcul du durcissement :

Les valeurs de l_{eff} trouvées ci-dessus sont dans toutes les conditions positives. Ce résultat suggère donc que, conformément à l'analyse faite au précédent chapitre, les dislocations restent toujours dans le régime ($l > 2y$) où le durcissement de la forêt ne doit avoir pour seule origine qu'un effet de la longueur.

On va donc pouvoir appliquer la même formule que celle développée dans le chapitre IV pour $\Delta\tau$ avec, cependant, une correction importante. Dans le cas d'un réseau de carbures symétriquement alignés, les dislocations vis franchissaient tous les précipités en ligne et en même temps. C'est pourquoi, la totalité de la déformation plastique est dans ce cas produite par le seul déplacement des sections vis. Maintenant, dans le cas d'un réseau de dislocations forêt aléatoirement distribuées, nous avons montré dans la section de ce chapitre traitant des propriétés des jonctions (figure (8) et figure (9)) que les jonctions sont détruites de manière équiprobable, soit par le déplacement des sections vis, soit par le déplacement des sections

courbées non-vis. Comme discuté dans le modèle de Louchet et *al.* [Louchet 1979], la vitesse de déformation associée aux sections vis est alors seulement la moitié de la vitesse de déformation totale imposée. Comme dans le cas du durcissement induit par une distribution aléatoire de carbures, on a ici écrit une formule identique à celle de la rangée de carbures, mais en considérant une vitesse des dislocations vis divisée par deux dans le régime de franchissement de la forêt :

$$\Delta\tau_l = \tau_o \frac{kT}{\Delta H_o} \ln\left(\frac{l_o}{l_{eff}}\right) \left[2 + \frac{kT}{\Delta H_o} \ln\left(\frac{v^2 / 2}{H^2 l_o l_{eff}}\right) \right] \quad (41)$$

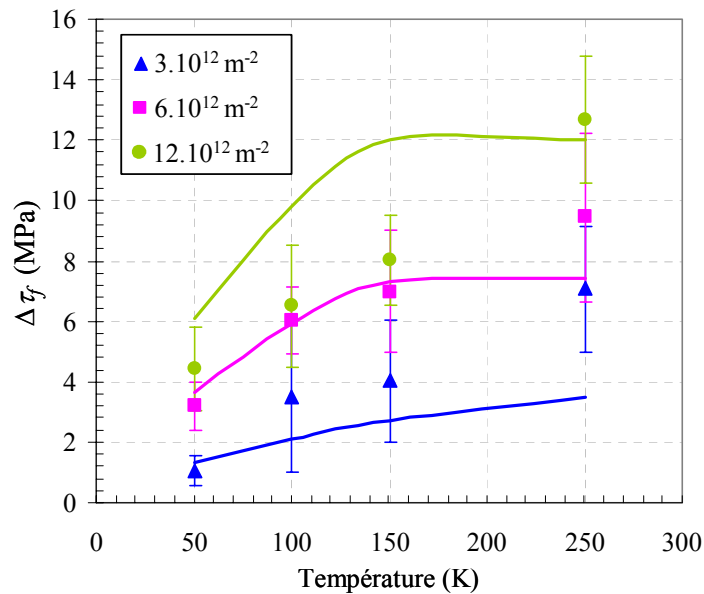


Figure 18 - Comparaison entre le durcissement mesuré à travers les simulations et la prédiction de notre modèle du durcissement en ne retenant qu'un effet de longueur, $\Delta\tau_l$. Les solutions de l'équation (41) sont présentées en ligne continue.

La comparaison entre les résultats des simulations et les prédictions du durcissement associées à l'équation (41) est tracée sur la figure (18). On voit que pour les deux densités $3 \cdot 10^{12}$ et $6 \cdot 10^{12} m^{-2}$, les prédictions du modèle sont en bon accord avec les simulations pour les températures comprises entre 50 et 150 K. Il semble donc que l'analyse physique faite capture l'essentiel du durcissement mesuré lors des simulations.

A 250 K, les solutions de l'équation (41) sont cependant systématiquement faibles. Pourtant, Il n'y a pas de bonne raison pour que cela puisse être imputé à la présence dans les simulations d'un durcissement additionnel athermique dû à la tension de ligne. En effet, à 250 K et avec une densité de la forêt de $3 \cdot 10^{12} m^{-2}$, la microstructure simulée ne contient presque pas de dislocations non-vis. L'inexactitude de l'équation (41) à cette température sera expliquée plus loin lors de la comparaison entre les résultats de simulations et le modèle de Tang et *al.* [Tang 1999].

A la densité de la forêt de $12.10^{12} \text{ m}^{-2}$, le durcissement mesuré avec les simulations est systématiquement plus faible que celui prédit avec l'équation (41). Il est tout à fait possible que dans ce cas, la statistique faite sur les courbes contrainte-déformation simulées ne soit pas suffisante pour évaluer correctement le vrai durcissement. En effet, à cette densité les temps de calculs deviennent très importants et la quantité de déformation utile pour calculer le durcissement moyen est faible.

4- Comparaison des résultats de simulations avec les autres modèles

Dans cette partie, on compare maintenant les résultats des simulations avec les trois modèles de durcissement présentés au début de ce chapitre. Dans un souci de concision, une comparaison est faite avec uniquement les résultats obtenus pour la densité de la forêt intermédiaire de 6.10^{12} m^{-2} , mais toutes les remarques qui suivent peuvent être généralisées à toutes les densités considérées. Toutes les comparaisons sont regroupées dans la figure (19). Bien sûr, les données utilisées pour évaluer le durcissement prédit par chaque modèle sont les mêmes que celles utilisées pour tester notre nouveau modèle.

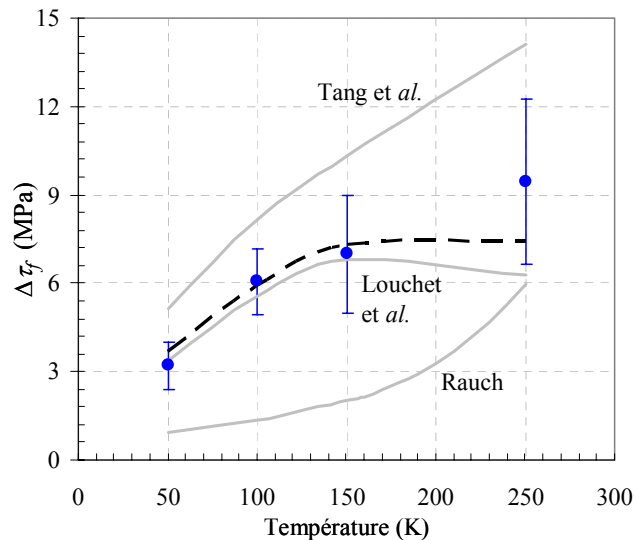


Figure 19 - Comparaison entre les résultats des simulations avec une densité de la forêt de 6.10^{12} m^{-2} , notre modèle de durcissement (équation (41)) et les trois modèles de la littérature [Louchet 1979 – Rauch 1994 – Tang 1999]. Dans le modèle de Tang et al., uniquement l'effet de longueur est reproduit dans cette figure.

Comme attendu, le modèle de Louchet et al. (équations (6) ou (8)) est en relativement bon accord avec nos résultats de simulations. Ce modèle est en effet basé sur des hypothèses très similaires que celles qui nous ont conduits à l'équation (41). Cependant, il faut noter que pour faire la comparaison de la figure (19), les valeurs de la distance critique, x_c , utilisées sont les distances critiques définies dans notre nouveau modèle, c'est-à-dire incluant la longueur des jonctions. Il faut souligner que ces valeurs de x_c sont beaucoup plus grandes que les valeurs

expérimentales mesurées par Louchet et *al.* dans le cas du niubium. Si la longueur des jonctions déterminée par les simulations n'est pas incluse dans le modèle de Louchet et *al.*, ce dernier donne des valeurs du durcissement beaucoup trop faibles.

Comme illustré sur la figure (19), le modèle de Rauch (équation (18)) donne un durcissement assez éloigné des mesures faites à travers la simulation. Ce modèle qui considère uniquement un effet de tension de ligne ne semble donc pas pouvoir s'appliquer aux densités de la forêt que nous avons simulées. Par ailleurs, une des hypothèses fortes de ce modèle qui consiste à supposer que la force d'ancrage des jonctions (définie avec l'angle θ) décroît avec la température ne semble pas confirmée par la simulation. Il semble donc raisonnable de dire que ce modèle a peu de chances de pouvoir s'appliquer aux basses températures. En effet, à ces températures, la contrainte d'écoulement est très grande et donc la contrainte effective intervenant dans la mobilité des dislocations ne doit pas être sensible à un effet de tension de ligne associé à la courbure des sections non-vis.

Finalement, nous avons tracé dans la figure (19) le résultat du modèle de Tang et *al.* (équation (25)) en ne retenant de ce dernier que la partie directement associée à un effet de longueur. En effet, la comparaison avec nos simulations montre que la solution générale (incluant un effet direct de la tension de ligne) donne des valeurs du durcissement beaucoup trop grandes. Une fois encore, l'hypothèse d'un effet de la tension de ligne direct sur le durcissement n'est pas compatible avec la dynamique des dislocations observée lors des simulations. Par contre, si l'on ne retient de l'équation (25) que la première partie, soit :

$$\Delta\tau_f = S_0 \ln\left(\frac{l_0}{l}\right), \quad (42)$$

les résultats de cette forme simplifiée du modèle de Tang et *al.* sont relativement en bon accord avec les résultats des simulations (figure (19)). Cependant, les valeurs trouvées sont systématiquement assez fortes. Il faut noter également que le fait que le modèle se comporte mieux à 250 K par rapport aux autres modèles est fortuit puisque l'approximation faite dans la loi de vitesse pour se ramener à un simple terme logarithmique n'est justifiée qu'à basse température.

Cependant, l'analyse du modèle de Tang et *al.* nous a conduit à une observation importante et qui suggère une correction simple aux modèles basés sur un effet de la longueur des sections vis. En fait, la contrainte effective intervenant dans l'énergie d'activation pour former les doubles-décrochements est de la forme : $\tau^* = \tau - \tau_{TL}$. C'est-à-dire que l'on suppose que la formation des doubles décrochements contrôlant la mobilité des sections droites vis est directement influencée par la tension de ligne exercée par la courbure des sections non-vis aux extrémités. Cette hypothèse nous semble très forte et incompatible avec les observations faites dans nos simulations. Cependant, cette approche suggère que le volume d'activation pour former des doubles-décrochements peut être diminué par des interactions élastiques à longue distance entre sections vis et sections non-vis. Cette possibilité peut être testée simplement à l'aide de l'équation (43) et d'une évaluation moyenne des interactions

élastiques à longue distance faite par Gomez-Garcia et *al.* dans le cas de la forêt [Gomez-Garcia 2006]. On écrit alors qu'en présence de la forêt, la contrainte effective doit être de la forme :

$$\tau^* = \tau - 0,2 \left(\frac{\mu b}{4\pi} \frac{1-2\nu}{1-\nu} \frac{1}{R} \ln \left(\frac{\rho_f^{-1/2}}{b} \right) \right) \quad (43)$$

Si l'on admet qu'un effet des interactions à longue distance n'a géométriquement de chance d'être significatif que lorsque $l_{eff} \approx 2R$, on vérifie alors qu'une telle correction n'a aucune influence sur le durcissement obtenu à basse température (où l_{eff} et τ sont grandes), mais qu'elle ne devient plus négligeable à 250 K. Cette idée, testée dans notre modèle, a permis de retrouver un accord idéal entre l'équation (41) et les résultats des simulations (figure (20)).

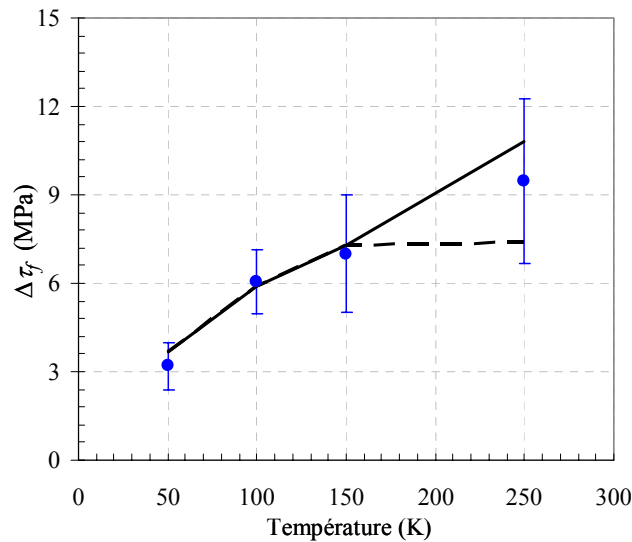


Figure 20 - Comparaison entre les résultats de simulation (les points) avec, (a) notre modèle de durcissement (équation (41)) tenant compte de l'effet de longueur (en pointillées) et les trois modèles de la littérature (pour le modèle de Tang et *al.*, on trace seulement la partie associée à l'effet de longueur), (b) notre modèle de durcissement (équation (41)) (en pointillés) et le même modèle incluant une correction de la contrainte effective à 250 K (équation (43)).

Conclusions

Le durcissement associé aux interactions entre dislocations à basse température est un problème complexe qui a nécessité la mise en œuvre de simulations DD difficiles à réaliser.

Avec l'expérience acquise dans le cas des carbures, notre analyse du durcissement de la forêt s'est focalisée sur un seul cas simple qui peut être analysé en détail. Pour cela, nous avons réalisé des simulations de la dynamique de dislocations vis infinies coupant dans leur plan de glissement une forêt de dislocations vis en interaction forte avec le système mobile. Cette solution idéalisée est en bon accord avec les microstructures des dislocations observées expérimentalement à basse température et en fin de stade 0.

Les résultats bruts des simulations montrent, d'une part qu'à une densité de la forêt fixe, le durcissement mesuré diminue avec la température et d'autre part que si la densité de la forêt augmente, le durcissement augmente. Ces résultats sont en bon accord avec l'expérience et expliquent pourquoi l'effet de la température (ou de la vitesse de déformation) dans le régime thermique est souvent traité de façon phénoménologique comme une diminution du coefficient de Taylor (*cf.* figure (21)).

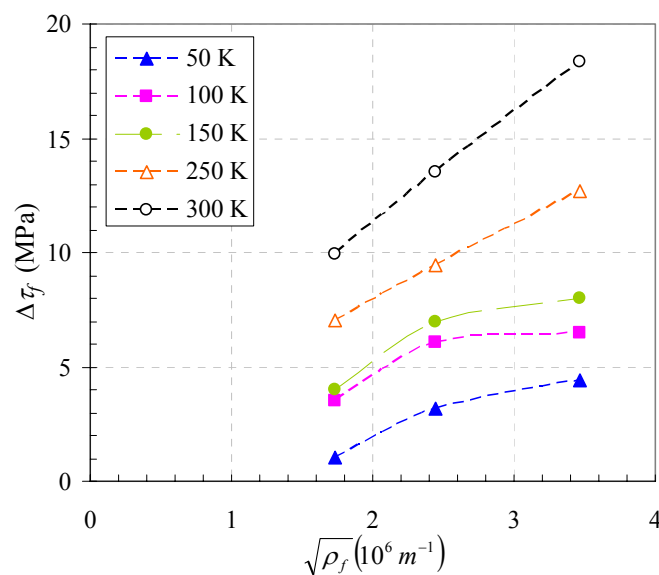


Figure 21 - Durcissement de la forêt simulé à différentes températures en fonction de la racine carrée de la densité de la forêt.

Une telle approche n'est pas justifiée théoriquement et nous avons montré formellement que le coefficient de Taylor qui caractérise, dans le modèle de la forêt, la stabilité moyenne des jonctions doit être considéré comme constant puisque la longueur des jonctions trouvées dans les microstructures simulées est indépendante de la température.

A partir du modèle développé au chapitre IV pour les carbures, on montre que le durcissement trouvé avec les simulations considérant des densités de la forêt comprises entre 3.10^{12} et $12.10^{12} \text{ m}^{-2}$, s'explique par un effet de réduction de la longueur effective des sections vis. L'équation maitresse de ce durcissement, $\Delta\tau_l$, trouvée au chapitre IV peut être modifiée pour prendre en compte la géométrie particulière associée au franchissement de la forêt.

Bien qu'aucun effet de la tension de ligne exercée par les sections non-vis courbées ne nécessite d'être pris directement en compte pour toutes les simulations réalisées, nos résultats montrent qu'aux plus grandes températures (près de la température de transition athermique), la présence de longues sections non-vis peut avoir une influence sur la mobilité des sections vis courtes à travers un écrantage élastique qui diminue la nucléation des doubles-décrochements et donc la mobilité des sections vis.

Références bibliographiques

- [Brown 1971] – L. Brown, R. Ham, «Dislocation-particle interactions», dans « Strengthening Methods in Solids». Ed. A. Kelly and R. Nicholson, Applied Science Publishers, Barking, Essex (UK), 9 (1971)
- [Bulatov 1998] – V. Bulatov, F. F. Abraham, L. Kubin, B. Devincere, S. Yip, *Nature*, 391, 669 (1998)
- [Bulatov 2006] – V. V. Bulatov et *al.*, *Nature*, 440, 1174 (2006)
- [Devincere 1992] – B. Devincere, M. Condat, *Acta Metall.*, 40, 2629 (1992)
- [Devincere 2005] – B. Devincere, T. Hoc, and L. Kubin, *Mater. Sc. and Eng. A*, 400, 182 (2005)
- [Devincere 2006] – B. Devincere, L. Kubin, T. Hoc, *Scripta Mat.*, 57, 905 (2006)
- [Foreman 1966] – A. J. E. Foreman, M. J. Makin, *Phil. Mag.*, 13, 911 (1966)
- [Franciosi 1985] – P. Franciosi, *Acta Metall.*, 33, 1601 (1985)
- [Fridel 1961] – J. Fridel, dans « Dislocations », Pergamon Press, Oxford (1964)
- [Gomez-Garcia 2006] – D. Gomez-Garcia, B. Devincere, L. Kubin, *Phys. Rev. Lett.*, 96(12), 125503 (2006)
- [Hernandez Olivares 1987] – F. Hernández Olivares, J. G. Sevillano, *Acta metall.*, 35, 631 (1987)
- [Keh 1963] – A. Keh, S. Weissmann, « Deformation substructure in body-centered cubic metals ». Dans « Electron Microscopy and Strength of Crystals », Ed. G. Thomas, J. Washburn, 231, New-York (1963)
- [Kubin 2003] – L. P. Kubin, R. Madec, B. Devincere, « Multiscale phenomena in materials-experiments and modelling related to mechanical behaviour ». Ed. H. Zbib et *al.*, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 779, W1.6 (2003)
- [Louchet 1979] – F. Louchet, L. P. Kubin, D. Vesely, *Phil. Mag. A*, 39, 433 (1979)
- [Madec 2001] – R. Madec, Thèse de doctorat de l'Université d'Orsey (2001)
- [Madec 2002] – R. Madec, B. Devincere, L. P. Kubin, *Phys. Rev. Letters*, 89, 255508-1 (2002)
- [Madec 2004] – R. Madec, L. P. Kubin, CIMTEC proceedings, 671 (2004)
- [Madec 2005] – R. Madec, L. Kubin. Ed. P. Vincenzini, A. Lami, 3rd international conference computational modelling and simulation of materials, A, 671, Techna Group Srl (2005)
- [Monnet 2004] – G. Monnet, B. devincere, L. Kubin, *Acta Mater*, 52, 4317 (2004)
- [Perrera Da Costa 2004] – C. Perrera Da Costa, rapport de stage de l'INPG (2004)
- [Queyreau 2008] – S. Queyreau, Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie (2008)
- [Rauch 1994] – E. F. Rauch, *Key Engineering Materials*, 97-98, 371 (1994)
- [Rodeney 1999] – D. Rodeney, R. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* , 82, 1704 (1999)
- [Saada 1960] – G. Saada, *Acta Metall.*, 8, 841 (1960)
- [Schöeck 1972] – G. Schöeck, R. Frydman, *Phys. Stat. Sol.*, 53, 661 (1972)
- [Sevillano 1993] – J. G. Sevillano, « Plastic deformation and fracture in materials ». Ed. H. Mughrabi, 19 (1993)
- [Tang 1998] – M. Tang, L. P. Kubin, G. R. Canova, *Acta mater.*, 46, 3221 (1998)

[Tang 1999] – M. Tang, B. Devincre, L. P. Kubin, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 7, 893
(1999)

[Wickham 1999] – L. K. Wikham, K. W. Schwarz, J. S. Stolken, *Phys. Rev. Lett.* , 83, 4574
(1999)

Conclusion générale

Ce travail porte sur l'étude du comportement mécanique intra-lattes à basse température de la ferrite. L'étude est réalisée à l'aide de simulations de dynamique des dislocations. Ces simulations sont basées sur une analyse physique du comportement des dislocations issue de la théorie élastique où les lois de mobilité constituent les seules données d'entrée.

La première partie de ce travail a montré qu'une loi de mobilité des dislocations vis peut être déduite à partir des résultats expérimentaux donnant l'évolution de la contrainte critique en fonction de la température à une vitesse de déformation donnée. Il a été noté que la contrainte critique doit être relevée à la fin du stade zéro et est différente de la limite d'élasticité conventionnelle. La loi de mobilité obtenue est une loi en sinus hyperbolique qui n'est valable que dans le domaine de température/contrainte où la germination des double-décrochements contrôle la dynamique de la ligne de la dislocation. Au voisinage de la température athermique, cette loi doit laisser la place à la loi de mobilité visqueuse, typique du régime athermique. Pour la loi de mobilité des dislocations non-vis, compte tenu des connaissances actuelles, une simple proportionnalité avec celle des dislocations vis a été adoptée. Le facteur de proportionnalité tend vers l'infini lorsque la température tend vers le zéro absolu et s'approche de l'unité au voisinage de la température athermique.

Dans le cadre de l'étude de l'ancrage des dislocations vis par des obstacles de type carbures ou par d'autres dislocations, il a été montré que l'écart de mobilité entre les dislocations de différents caractères conduit toujours à une différence entre la contrainte effective vue par les dislocations vis et celle vue par les dislocations non-vis. Ceci permet aux sections non-vis d'acquies une courbure, de rayon R , et par conséquent, de réduire la force effective des obstacles. Cette courbure « gratuite » est la révélation principale de notre travail et permet d'expliquer la plupart de nos résultats.

Pour les deux mécanismes de durcissement étudié, en fonction du rapport entre l'espacement entre obstacles et le rayon R , deux cas de figures ont été mis en évidence à travers les simulations :

- **Pour un espacement d'obstacles large devant le rayon de courbure R** , le caractère vis continue à être prédominant dans la microstructure. La contrainte d'écoulement reste contrôlée par la mobilité des dislocations vis, et le durcissement a une seule origine : la diminution de la longueur moyenne des sections droites de caractère vis. Nous appelons cette origine de durcissement « l'effet de longueur ». Nous pouvons alors distinguer trois facteurs influençant la contrainte d'écoulement.

Effet de la température à microstructure et vitesse de déformation constantes : L'évolution de la contrainte effective avec la température suit l'évolution d'un polynôme de deuxième degré. Aux températures assez basses, l'évolution devient linéaire.

Effet de la vitesse de déformation à microstructure et température constantes : La vitesse de déformation intervient, selon la relation d'Orowan, dans l'équation au travers de la vitesse des dislocations moyenne v , imposée par le chargement.

Effet de la microstructure à vitesse de déformation et température constantes : La présence d'obstacles force une diminution de la longueur moyenne L des sections de caractère vis dans la microstructure. Si ρ_s est la densité surfacique de ces obstacles, L peut être donnée par la relation : $(\rho_s x_c)^{-1}$, où x_c représente l'amplitude de déplacement des dislocations vis afin de dépasser l'obstacle. x_c dépend de la force des obstacles α et de leur taille (cf diamètre des particules et longueur de jonctions), du module de cisaillement μ et de l'écart de mobilité entre dislocations de différents caractères.

La loi de comportement peut être écrite, dans ce cas, sous la forme :

$$\tau = \tau_0 \left[1 - A T \ln \left(\frac{B \rho_m}{\alpha \mu \dot{\gamma} \rho_{obs}} \right) \right]^2 + \tau_f$$

où τ_0 , A et B sont constantes et τ_f la friction d'alliage athermique. Il en résulte que l'effet de la vitesse de déformation et de la microstructure est couplé à la température : plus la température est basse, plus est faible l'effet de la microstructure et de la vitesse. Pour la microstructure étudiée, composée de carbures et d'une densité de dislocations de 10^{13} m^{-2} , la contrainte d'écoulement est bien décrite par l'équation ci-dessus. Le durcissement lié aux carbures et à la forêt de dislocations dans la ferrite augmente avec la température jusqu'à sa valeur maximale atteinte dans le régime athermique. En d'autres termes, tous les durcissements liés à la microstructure diminuent rapidement lorsque la température décroît de la température de transition athermique au zéro absolu. C'est la conclusion principale de notre travail dans cette thèse.

Dans le cas de la forêt, il faut par ailleurs retenir que pour les températures les plus élevées (proches de la température de transition athermique), l'interaction élastique entre les sections vis et les sections non-vis courbées écrante partiellement le chargement appliqué. Dans ces conditions une correction simple au calcul de l'effet de longueur doit être faite pour calculer exactement le durcissement de la forêt.

- **Pour un espacement entre obstacles comparable ou plus faible que le rayon de courbure R** , les dislocations vis droites disparaissent de la microstructure lors de l'écoulement plastique. Dans ce cas, en plus de l'effet de longueur, une composante athermique de durcissement est mise en évidence par nos simulations. Il s'agit de l'effort mécanique nécessaire pour l'augmentation de la courbure des dislocations vis

ancrées jusqu'à la courbure critique. Cette composante, appelée « effet de tension de ligne », dépend de la forme exacte de la loi de mobilité des dislocations non-vis, une information qui malheureusement n'est pas à notre portée actuellement. Si l'écart de contrainte effective sur les dislocations vis et non-vis, à une température et vitesse de déformation fixes, est noté $\Delta\tau_{coin}$, alors nous pouvons poser la forme générale de la loi d'écoulement sous la forme :

$$\tau = \tau_0 \left[1 - AT \ln \left(\frac{B\rho_m}{\alpha \mu \dot{\gamma} \rho_{obs}} \right) \right]^2 + \left(\sqrt{\frac{\ln^3 2D}{\ln l} \frac{\mu b}{2\pi l}} - \Delta\tau_{coin} \right) + \tau_f$$

Lorsque la température tend vers le zéro absolu, la contrainte effective tend vers τ_0 . Dans ce cas, la contrainte d'écoulement est décrite uniquement par l'effet de tension de ligne et la friction d'alliage. Ce second régime de durcissement n'a été validé durant la thèse que dans le cas des particules. Dans le cas du durcissement de la forêt, les densités de dislocations considérées étaient sous évaluées pour simuler ce régime.

Dans tous les cas, nous pouvons conclure que les durcissements provoqués par les deux sources, précipités et forêt, dans le régime thermique restent nettement inférieurs à celui obtenu dans le régime athermique.

Perspectives

A travers ce travail, on peut distinguer deux axes de perspectives, à savoir le comportement plastique du fer et le comportement mécanique de l'acier de cuve.

Concernant le comportement plastique du fer, trois points méritent d'être considérés dans des études futures :

- l'intégration des systèmes de glissement du type $\{112\}$ dans les simulations DD afin de fournir tous les degrés de liberté nécessaires à l'accommodation de la déformation plastique. Dans ce cadre, les lois de mobilité des dislocations dans ces plans doivent être déterminées. Les données expérimentales dans la littérature concernant ces systèmes de glissement sont peu nombreuses. Il serait donc utile dans un premier temps d'obtenir cette information de simulations atomiques par dynamique moléculaire ;
- le rapport de mobilité, $K(T)$, entre dislocation vis et non-vis est un paramètre partiellement inconnu des simulations et des équations de notre modèle de durcissement du régime thermique. Une étude de sensibilité de nos résultats à ce paramètre permettrait de déterminer exactement son importance en attendant de mieux connaître la vraie mobilité des dislocations non-vis ;
- le rôle du glissement dévié reste mal connu à basse température. Des informations sur ce point sont susceptibles de nous parvenir à partir des simulations faites à l'échelle atomiques. Lorsque cette information sera déterminée, il sera important de vérifier l'effet de ce mécanisme sur les principales conclusions de ce travail.

Concernant le comportement mécanique de l'acier de cuve, deux points méritent d'être considérés dans des études futures :

- si le cas de larges espacements d'obstacles est relativement facile à modéliser, la simulation d'une grande densité d'obstacles surfacique reste un exercice difficile. D'une part, beaucoup de données expérimentales nous manquent et, d'autre part, la mise en place de tels types de simulations est délicat et nécessite un temps de calcul élevé. La réalisation en soi de ce type de simulation peut constituer un objectif à venir pour des applications technologiques ciblées ;
- une fois ce type de simulations au point, nous pourrions aller plus loin et déterminer le durcissement induit par des défauts d'irradiation sur la contrainte d'écoulement dans le matériau. Ceci nécessite préalablement la prise en compte des énergies d'activation

pour le cisaillement des précipités, cavités, micro-boucles de dislocations, etc. Nous aurons alors besoin d'une importante quantité de données devant être obtenus par des simulations faites à l'échelle atomique, mais manquantes à ce jour.

Annexe A : Acier de cuve

Microstructure

La cuve des réacteurs à eau sous pression (REP) est constituée d'un assemblage de viroles forgées (figure (1)). L'acier servant à la fabrication de ces viroles (16MND5) appartient à la famille des aciers faiblement alliés contenant le manganèse, le nickel et le molybdène. Sa composition chimique moyenne est indiquée dans le tableau (1). Elle est comparable à la composition chimique d'autres nuances utilisées dans le nucléaire, telles que les aciers de la norme américaine A5333B et A508 C13.

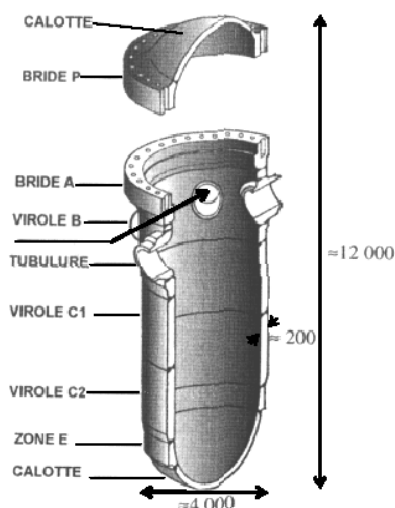


Figure I.5 - Vue de coupe d'une cuve de réacteur à eau sous pression indiquant les principaux composants et leurs dimensions [Haušild 2002]

C	S	P	Mn	Si	Ni	Cr	Mo	V	Cu	Co
0,15	< 0,03	0,006	1,37	0,21	0,71	0,24	0,50	0,006	0,06	0,01

Tableau 1 - Composition chimique de l'acier 16MND5 (pourcentage massique) [Diawara 2007]

Avant de présenter la microstructure de l'acier de cuve, il semble indispensable de donner un aperçu de l'ensemble des traitements thermiques subis par le matériau dans le but d'avoir les propriétés mécaniques nécessaires pour le bon fonctionnement de la cuve. La série de ces traitements thermiques effectués comporte trois étapes:

- 1- un traitement thermique de précaution qui consiste en une austénitisation (900°C-6h30), une trempe (350°C) et un revenu (650°C-6h30). Le but c'est d'homogénéiser la

microstructure et éliminer les éventuels carbures et inclusions précipités au moment du forgeage,

- 2- un traitement thermique de qualité qui a pour but conférer aux viroles les propriétés microstructurales recherchés. Il consiste en une austénitisation (865°C-4h), suivie d'une trempe (25°C) et d'un revenu (650°C-5h). Cette dernière étape du traitement permet entre autres d'atténuer les différences microstructurales qui apparaissent dans l'épaisseur de la virole,
- 3- et enfin, un traitement thermique de détensionnement, consistant en un revenu (615°C-8h). Le but est de relaxer les contraintes internes créées pendant l'assemblage des viroles.

Au cours des traitements thermiques subits, l'acier de cuve est lieu à différentes transformations métallurgiques. La microstructure obtenue a fait l'objet de plusieurs observations et interprétations dans la littérature.

La figure (2) montre une micrographie optique de l'acier de cuve interprétée comme une bainite revenue. Cette appellation est choisie par certains auteurs [Carassou 2000 – Diawara 2007 – Mathieu 2006] pour rappeler les traitements thermiques subits par le matériau. D'autres observations définissent la microstructure comme une bainite granulaire revenue constituée de ferrite pauvre en précipités avec des carbures regroupés en amas [Sestier 1998] ou alors comme une bainite supérieure ou inférieure suivant les régions observées [Miloudi 1997 – Pesci 2004]. Une autre interprétation des observations décrit plutôt la microstructure comme composée de bainite supérieure et ferrite aciculaire [Haušild 2002 – Novaha 2003]. Il faut souligner, cependant, que cette différence d'interprétation des observations est due à deux facteurs, la complexité de la microstructure et le prélèvement des échantillons à des épaisseurs différentes de la virole. Dans les paragraphes qui suivent, on détaillera uniquement les deux principaux constituants de cette microstructure dont on tiendra compte dans cette étude : la ferrite et le carbures.

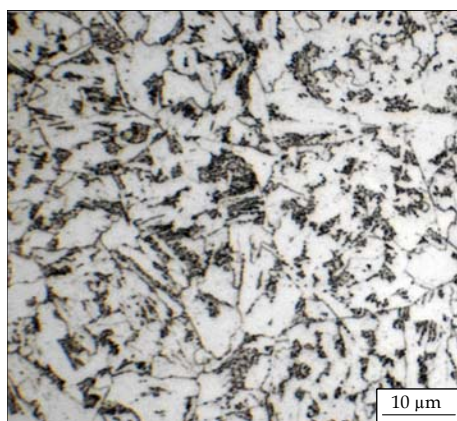


Figure 2 – Micrographie de la microstructure de l'acier de cuve obtenue par microscope optique [Diawara 2007]

Enfin, à travers des cartographies élaborées par diffraction des électrons rétrodiffusés (EBSD), il a été noté que l'acier de cuve ne présente pas de texture cristallographique

marquée [Mathieu 2006 – Novaha 2003] ce qui s'explique par l'efficacité des traitements thermiques subits. En se basant sur des clichés de Microscope optique (MO), la taille des grains austénitiques a été estimée dans la littérature variant entre 20 et 40 μm [Diawara 2007 – Haušild 2002 – Renevey 1998 – Tanguy 2001].

Le mécanisme de transformation bainitique consiste en une croissance de lattes de ferrite à partir des joints austénitiques ou dans les grains austénitiques. Pendant la transformation, l'austénite est sursaturée en carbone qui précipite sous forme de carbures à la fin de la transformation. A partir de là, on peut noter que la phase ferritique de l'acier de cuve se présente comme des lattes. La détermination de la forme et les dimensions exactes de cette phase est très délicat du fait que les lattes sont difficilement distinctes. Néanmoins, nombreux travaux ont pu mettre en évidence deux types de paquets de lattes: les paquets morphologiques et les paquets cristallographiques (appellation commune à plusieurs auteurs [Gourgues 2000 – Haušild 2002 – Mathieu 2006]). Les paquets morphologiques représentent les paquets apparents en microscope optique ou électronique qui sont souvent confondus avec les anciens grains austénitiques, et les paquets cristallographiques que l'on peut distinguer par EBSD. Il faut noter, cependant, que Haušild [Haušild 2002] constate un chevauchement des deux types de lattes, tandis que Mathieu [Mathieu 2006] traduit ses observations par le fait qu'un paquet morphologique peut être composé de plusieurs paquets cristallographiques.

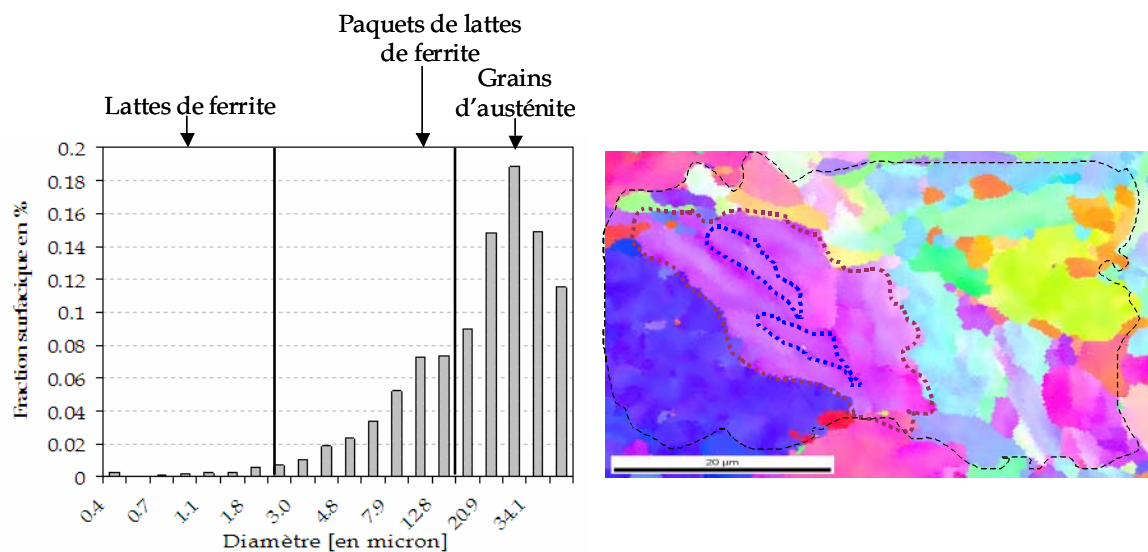


Figure 3 - Distribution de taille de lattes et de paquets de lattes à l'intérieur d'un ancien grain austénitique dans l'acier de cuve, réalisée par EBSD [Diawara 2007]

La figure (3) montre une distribution de tailles de lattes et de paquets de lattes réalisée par Diawara en supposant une tolérance angulaire de 15° sur l'orientation du grain [Diawara 2007]. Les paquets de lattes sont caractérisés par une forte désorientation (50 à 60°). Cependant, les lattes qui apparaissent comme une légère variation de coloration au sein du paquet, sont caractérisées par une très faible désorientation ($0,6$ et $0,8^\circ$). L'épaisseur des paquets de lattes varie entre 10 et 20 μm , l'épaisseur des lattes est évaluée entre 0,8 et 1,5 μm

et leur longueur varie entre 10 et 13 μm [Diawara 2007]. Ces observations sont en accord avec les résultats de Haušild [Haušild 2002]. En ce qui concerne leur morphologie, les paquets de lattes semblent avoir une forme équiaxe [Haušild 2002] tandis que les lattes sont allongées.

Structure des dislocations

L'arrangement des dislocations dans l'acier de cuve, avant et après déformation, a été sujet à très peu de travaux d'observations par MET à cause des difficultés rencontrées liées essentiellement à la phase ferritique. Quelques observations ont permis, tout de même, d'estimer la densité des dislocations et donner une idée sur leur distribution. Avant déformation, la distribution des dislocations à l'intérieur des lattes de ferrite est considérée homogène (figue I.8) [Libert 2007]. En ce qui concerne leur densité, nombreux travaux évoquent une densité de l'ordre de 10^{14} m^{-2} [Karlik 2003 – Obertlik 2005 – Libert 2007 – Robertson 2007]. Cette dernière estimation est en accord avec l'ordre de grandeur de la densité initiale observée dans d'autres aciers bainitiques [Bhadeshia 1990].

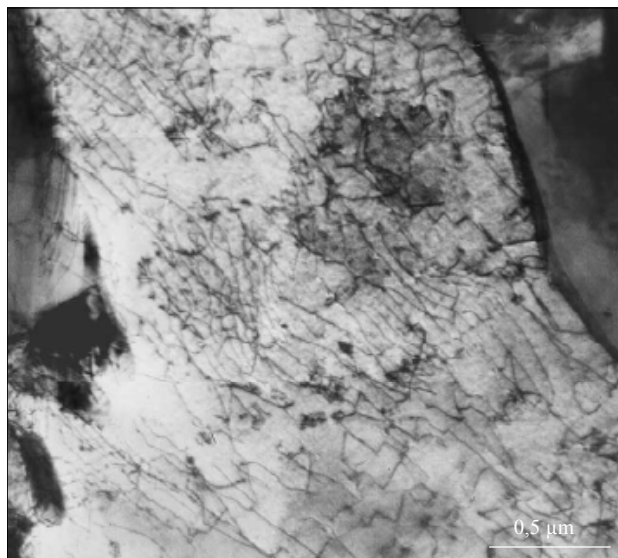


Figure 1 - Microstructure des dislocations avant déformation, observée au MET [Karlik 2003]

Après déformation, nombreux travaux évoquent une distribution uniforme de dislocations [Obertlik 2005 – Robertson 2007 – Libert 2007]. Pour les échantillons déformés à basse température (-196°C), Libert [Libert 2007] souligne une microstructure de dislocations formée essentiellement de segments rectilignes de caractère vis tandis que celle observée à 25°C est formée par des dislocations courbées. Ces interprétations ne sont pas satisfaisantes dans la mesure où aucun repérage des orientations des lattes observées n'a été effectué. Dans le travail de Robertson [Robertson 2007], le repérage des orientations a bien été pris en compte mais les segments rectilignes de caractère vis ne sont pas clairement distinguables sur ses micrographies à basse température.

Références bibliographiques

- [Bhadeshia 1990] – H. K. D. H. Bhadeshia, J. W. Christian, Metall. Trans., A21, 767 (1990)
- [Carassou 2000] – S. Carassou, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris (2000)
- [Diawara 2007] – B. Diawara, stage de master IMAPC, Université Louis Pasteur de Strasbourg – eDF
- [Gourgues 2000] – A. F. Gourgues, H. M. Flower, T. C. Lindley, Mater. Sci. Technol., 16, 26 (2001)
- [Haušild 2002] – P. Haušild, Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Paris (2002)
- [Karlik 2003] – M. Karlik, I. Nedbal, J. Siegl, Mater. Sci. Eng., A00, 1 (2003)
- [Libert 2007] – M. Libert, Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Paris (2007)
- [Mathieu 2006] – J. P. Mathieu, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers (2006)
- [Miloudi 1997] – S. Miloudi, Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay (1997)
- [Novaha 2003] – J. Novaha, P. Haušild, M. Karlik, P. Bompard, Mater. Charact., 49, 211 (2003)
- [Obrtlík 2005] – K. Obrtlík, C. F. Robertson, B. Marini, J. Nucl. Mater., 342, 35 (2005)
- [Pesci 2004] – R. Pesci, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers (2004)
- [Renevey 1998] – S. Renevey, Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay (1998)
- [Robertson 2007] – C. F. Robertson, K. Obrtlík, B. Marini, J. Nucl. Mater., 366, 58 (2007)
- [Sestier 1998] – K. Sestier, Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble (1998)
- [Tanguy 2001] – B. Tanguy, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris (2001)

Annexe B : Base de vecteurs de discrétisation pour la structure cubique centrée

La base de vecteurs de discrétisation (BVD) utilisée dans ce travail est présentée ci-dessous.

Indice	Plan	vecteur ligne (/6)	vecteur déplacement
Système numéro 1			
1:	(1 1 0)	[1 -1 1]	[4 -4 -8]
2:	(1 1 0)	[0 0 2]	[6 -6 0]
3:	(1 1 0)	[-2 2 4]	[2 -2 2]
4:	(1 1 0)	[-1 1 1]	[4 -4 8]
5:	(1 1 0)	[-1 1 -1]	[-4 4 8]
6:	(1 1 0)	[0 0 -2]	[-6 6 0]
7:	(1 1 0)	[2 -2 -4]	[-2 2 -2]
8:	(1 1 0)	[1 -1 -1]	[-4 4 -8]
Système numéro 2			
9:	(-1 0 1)	[1 -1 1]	[4 8 4]
10:	(-1 0 1)	[0 -2 0]	[6 0 6]
11:	(-1 0 1)	[-2 -4 -2]	[2 -2 2]
12:	(-1 0 1)	[-1 -1 -1]	[4 -8 4]
13:	(-1 0 1)	[-1 1 -1]	[-4 -8 -4]
14:	(-1 0 1)	[0 2 0]	[-6 0 -6]
15:	(-1 0 1)	[2 4 2]	[-2 2 -2]
16:	(-1 0 1)	[1 1 1]	[-4 8 -4]
Système numéro 3			
17:	(0 -1 -1)	[1 -1 1]	[-8 -4 4]
18:	(0 -1 -1)	[2 0 0]	[0 -6 6]
19:	(0 -1 -1)	[4 2 -2]	[2 -2 2]
20:	(0 -1 -1)	[1 1 -1]	[8 -4 4]
21:	(0 -1 -1)	[-1 1 -1]	[8 4 -4]
22:	(0 -1 -1)	[-2 0 0]	[0 6 -6]
23:	(0 -1 -1)	[-4 -2 2]	[-2 2 -2]
24:	(0 -1 -1)	[-1 -1 1]	[-8 4 -4]
Système numéro 4			
25:	(0 -1 1)	[1 1 1]	[-8 4 4]
26:	(0 -1 1)	[2 0 0]	[0 6 6]
27:	(0 -1 1)	[4 -2 -2]	[2 2 2]
28:	(0 -1 1)	[1 -1 -1]	[8 4 4]
29:	(0 -1 1)	[-1 -1 -1]	[8 -4 -4]
30:	(0 -1 1)	[-2 0 0]	[0 -6 -6]
31:	(0 -1 1)	[-4 2 2]	[-2 -2 -2]
32:	(0 -1 1)	[-1 1 1]	[-8 -4 -4]
Système numéro 5			
33:	(1 0 -1)	[1 1 1]	[4 -8 4]
34:	(1 0 -1)	[0 2 0]	[6 0 6]
35:	(1 0 -1)	[-2 4 -2]	[2 2 2]
36:	(1 0 -1)	[-1 1 -1]	[4 8 4]
37:	(1 0 -1)	[-1 -1 -1]	[-4 8 -4]
38:	(1 0 -1)	[0 -2 0]	[-6 0 -6]
39:	(1 0 -1)	[2 -4 2]	[-2 -2 -2]
40:	(1 0 -1)	[1 -1 1]	[-4 -8 -4]
Système numéro 6			
41:	(-1 1 0)	[1 1 1]	[4 4 -8]
42:	(-1 1 0)	[0 0 2]	[6 6 0]
43:	(-1 1 0)	[-2 -2 4]	[2 2 2]

44: (-1 1 0) [-1 -1 1] [4 4 8]
 45: (-1 1 0) [-1 -1 -1] [-4 -4 8]
 46: (-1 1 0) [0 0 -2] [-6 -6 0]
 47: (-1 1 0) [2 2 -4] [-2 -2 -2]
 48: (-1 1 0) [1 1 -1] [-4 -4 -8]

Système numéro 7

49: (-1 -1 0) [-1 1 1] [-4 4 -8]
 50: (-1 -1 0) [0 0 2] [-6 6 0]
 51: (-1 -1 0) [2 -2 4] [-2 2 2]
 52: (-1 -1 0) [1 -1 1] [-4 4 8]
 53: (-1 -1 0) [1 -1 -1] [4 -4 8]
 54: (-1 -1 0) [0 0 -2] [6 -6 0]
 55: (-1 -1 0) [-2 2 -4] [2 -2 -2]
 56: (-1 -1 0) [-1 1 -1] [4 -4 -8]

Système numéro 8

57: (1 0 1) [-1 1 1] [-4 -8 4]
 58: (1 0 1) [0 2 0] [-6 0 6]
 59: (1 0 1) [2 4 -2] [-2 2 2]
 60: (1 0 1) [1 1 -1] [-4 8 4]
 61: (1 0 1) [1 -1 -1] [4 8 -4]
 62: (1 0 1) [0 -2 0] [6 0 -6]
 63: (1 0 1) [-2 -4 2] [2 -2 -2]
 64: (1 0 1) [-1 -1 1] [4 -8 -4]

Système numéro 9

65: (0 1 -1) [-1 1 1] [8 4 4]
 66: (0 1 -1) [-2 0 0] [0 6 6]
 67: (0 1 -1) [-4 -2 -2] [-2 2 2]
 68: (0 1 -1) [-1 -1 -1] [-8 4 4]
 69: (0 1 -1) [1 -1 -1] [-8 -4 -4]
 70: (0 1 -1) [2 0 0] [0 -6 -6]
 71: (0 1 -1) [4 2 2] [2 -2 -2]
 72: (0 1 -1) [1 1 1] [8 -4 -4]

Système numéro 10

73: (1 -1 0) [1 1 -1] [4 4 8]
 74: (1 -1 0) [0 0 -2] [6 6 0]
 75: (1 -1 0) [-2 -2 -4] [2 2 -2]
 76: (1 -1 0) [-1 -1 -1] [4 4 -8]
 77: (1 -1 0) [-1 -1 1] [-4 -4 -8]
 78: (1 -1 0) [0 0 2] [-6 -6 0]
 79: (1 -1 0) [2 2 4] [-2 -2 2]
 80: (1 -1 0) [1 1 1] [-4 -4 8]

Système numéro 11

81: (-1 0 -1) [1 1 -1] [4 -8 -4]
 82: (-1 0 -1) [0 2 0] [6 0 -6]
 83: (-1 0 -1) [-2 4 2] [2 2 -2]
 84: (-1 0 -1) [-1 1 1] [4 8 -4]
 85: (-1 0 -1) [-1 -1 1] [-4 8 4]
 86: (-1 0 -1) [0 -2 0] [-6 0 6]
 87: (-1 0 -1) [2 -4 -2] [-2 -2 2]
 88: (-1 0 -1) [1 -1 -1] [-4 -8 4]

Système numéro 12

89: (0 1 1) [1 1 -1] [-8 4 -4]
 90: (0 1 1) [2 0 0] [0 6 -6]
 91: (0 1 1) [4 -2 2] [2 2 -2]
 92: (0 1 1) [1 -1 1] [8 4 -4]
 93: (0 1 1) [-1 -1 1] [8 -4 4]
 94: (0 1 1) [-2 0 0] [0 -6 6]

Annexe C : Procédure de traitement des jonctions

L'ensemble des règles locales dédiées à la formation de jonction ont un caractère essentiellement topologique. Il s'agit de définir, lorsque deux segments arrivent en contact, tous les cas possibles devant conduire à la formation d'une jonction. Ensuite, suivant les cas de figure, on oriente l'exécution du programme vers différentes solutions de discrétisation des lignes de dislocations. Dans ce qui suit, on va donner un résumé du travail de programmation effectué pour réécrire la partie du code microMégas traitant ces règles locales.

Dans le code microMégas, un segment est défini par les coordonnées de son origine, sa norme, l'indice du vecteur de discrétisation et ses voisins. Connaissant ces caractéristiques pour deux segments alignés i et j , on peut déterminer avec précision leurs positions géométriques relatives. La figure (1) présente deux exemples limites de configurations possibles.

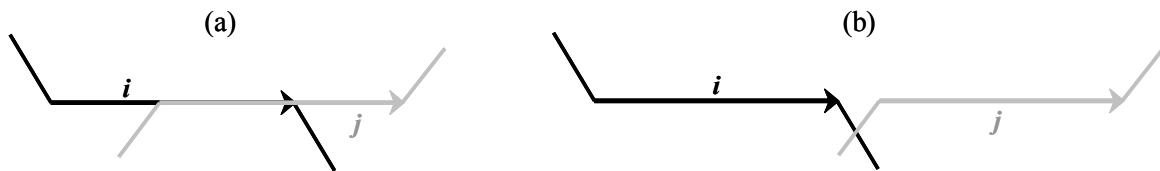


Figure 1 – Exemples limites de configurations de deux segments i et j susceptibles de former une jonction

L'ensemble de configurations déterminées sont au nombre de vingt six. Malgré leur différence, deux grands axes de traitement se distinguent. Ils sont basés sur la vérification s'il y'a recouvrement (figure (1-a)) ou pas (figure (1-b)) de sections appartenant aux deux segments.

Cas du recouvrement

Dans ce cas, le traitement consiste tout d'abord à déterminer la longueur de recouvrement à travers les normes des deux segments et la position relatives de leurs origines et leurs extrémités. Ensuite, suivant que les vecteurs de burgers des systèmes de glissement auxquels appartiennent les segments s'ont les mêmes ou différents, le traitement diffère. Dans un cas on a une annihilation et dans un autre on a une formation de jonction.

- Mêmes vecteurs de Burgers

Lorsque les deux segments ont le même vecteur de Burgers et se recouvrent sur une section, le résultat de l'interaction est une annihilation. Le traitement de ce cas de figure consiste à supprimer la section de recouvrement et connecter les segments restants. Un exemple de ce traitement est montré dans la figure (2). Le cas traité est celui de la figure (1-a).



Figure 2 – Exemple de traitement d'annihilation

Pour la configuration de cet exemple, la section de recouvrement est supprimée et la norme des segments i et j est réduite. Les voisins des deux segments ont changé pour satisfaire la connexion le long de la ligne. Par exemple, le nouveau voisin du segment i à son origine est remplacé par l'ancien voisin du segment j à son extrémité.

- Vecteurs de Burgers différents

Dans ce cas on a une formation de jonction. la norme. Le traitement de la configuration de la figure (1-a) est montré dans la figure (3).

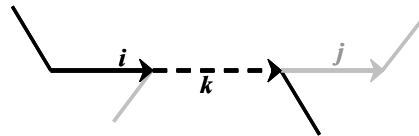


Figure 3 – Exemple de traitement de jonction

La procédure de traitement consiste à introduire un nouveau segment k dont la norme coïncide avec la longueur de recouvrement et le vecteur de discrétisation est celui de la jonction résultante. Comme le montre la figure, les voisins de ce segment sont ceux des anciens segments i et j .

Cas du non-recouvrement

Il s'agit de tous les cas où les deux segments ne se contactent pas (figure (1-a)) ou ils se contactent en un point. Le traitement fait appel à un paramètre de simulation qui est le nombre d'itérations où les deux segments sont dans une configuration de formation de jonction. Ce paramètre est limité par une valeur variant entre 3 et 5. Une fois cette valeur est atteinte et la jonction n'est pas encore formée, on détruit la configuration.

Annexe D : Calcul des expressions des asymptotes de $\Delta\tau_l$ et de $\Delta\tau_{coin}$

Le but de cette annexe est de montrer les étapes de calcul permettant d'avoir les expressions des asymptotes de $\Delta\tau_l$ et de $\Delta\tau_{coin}$ déterminées dans le chapitre IV.

Asymptotes de $\Delta\tau$

- A basse température/haute contrainte :

Quant la température est basse, la contrainte effective est assez élevée pour justifier l'approchement entre le sinus hyperbolique et l'exponentielle dans la loi de mobilité des dislocations vis. La vitesse, dans ce cas, d'une dislocation de longueur l_0 s'écrit :

$$v = H l_0 \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT} \left(1 - \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_0}}\right)\right)$$

L'expression de la contrainte qui découle de cette expression est :

$$\tau_{l_0} = \tau_0 \left(1 + \frac{kT}{\Delta H_0} \ln\left(\frac{v}{H l_0}\right)\right)^2 + \tau_f$$

Au contact des particules, la longueur de la dislocation diminue de l_0 à l . Le durcissement correspondant s'écrit :

$$\Delta\tau_p = \tau_l - \tau_{l_0} = \tau_0 \left(1 + \frac{kT}{\Delta H_0} \ln\left(\frac{v}{H l}\right)\right)^2 - \tau_0 \left(1 + \frac{kT}{\Delta H_0} \ln\left(\frac{v}{H l_0}\right)\right)^2$$

$$\Delta\tau_p = \tau_0 \frac{kT}{\Delta H_0} \ln\left(\frac{l_0}{l}\right) \left(2 + \frac{kT}{\Delta H_0} \ln\left(\frac{v^2}{H^2 l_0 l}\right)\right)$$

- A haute température/basse contrainte

Dans ce cas, la vitesse d'une dislocation vis de longueur l_0 s'écrit :

$$v = 2 H l_0 \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right) \sinh\left(\frac{\Delta H_0}{kT} \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_0}}\right)$$

Dans la mesure où la contrainte tend vers 0, le sinus hyperbolique peut être approché par son développement limité au premier degré :

$$v = 2 H l_0 \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right) \left(\frac{\Delta H_0}{kT} \sqrt{\frac{\tau^*}{\tau_0}}\right)$$

L'expression de la contrainte qui découle de cette expression est :

$$\tau_{l_0} = \tau_0 \left(\frac{v}{2 H l_0 \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right)} \frac{kT}{\Delta H_0} \right)^2 + \tau_f$$

Au contact des particules, la longueur de la dislocation diminue de l_0 à l . Le durcissement correspondant s'écrit :

$$\Delta\tau_l = \tau_l - \tau_{l_0} = \tau_0 \left(\frac{v}{2 H l \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right)} \frac{kT}{\Delta H_0} \right)^2 - \left(\frac{v}{2 H l_0 \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT}\right)} \frac{kT}{\Delta H_0} \right)^2$$

$$\Delta\tau_l = \tau_0 \left(\frac{1}{l^2} - \frac{1}{l_0^2} \right) \left(\frac{v k T}{2 H \Delta H_0} \exp\left(\frac{\Delta H_0}{kT}\right) \right)^2$$

Asymptotes de $\Delta\tau_{coin}$

Cette contrainte traduit la différence de la contrainte vue par une dislocation vis et celle par une dislocation coin se déplaçant à la même vitesse, v .

- A basse température/haute contrainte :

Dans ce cas, la vitesse, dans le cas de la dislocation vis et dans le cas de la dislocation coin s'écrit :

$$v = H l_0 \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT} \left(1 - \sqrt{\frac{\tau_{vis}^*}{\tau_0}}\right)\right) \quad \text{et} \quad v = K v_0 \exp\left(-\frac{\Delta H_0}{kT} \left(1 - \sqrt{\frac{\tau_{coin}^*}{\tau_0}}\right)\right)$$

Les expressions des deux contraintes, τ_{vis} et τ_{coin} sont :

$$\tau_{vis} = \tau_0 \left(1 + \frac{kT}{\Delta H_0} \ln\left(\frac{v}{H l_0}\right) \right)^2 + \tau_f \quad \text{et} \quad \tau_{coin} = \tau_0 \left(1 + \frac{kT}{\Delta H_0} \ln\left(\frac{v}{K v_0}\right) \right)^2 + \tau_f$$

La contrainte $\Delta\tau_{coin}$ s'écrit donc :

$$\Delta \tau_{coin} = \tau_{vis} - \tau_{coin} = \tau_0 \left(1 + \frac{kT}{\Delta H_0} \ln \left(\frac{v}{Hl} \right) \right)^2 - \tau_0 \left(1 + \frac{kT}{\Delta H_0} \ln \left(\frac{v}{Kv_0} \right) \right)^2$$

$$\Delta \tau_{coin} = \tau_0 \frac{kT}{\Delta H_0} \ln \left(\frac{Kv_0}{Hl} \right) \left(2 + \frac{kT}{\Delta H_0} \ln \left(\frac{v^2}{HlKv_0} \right) \right)$$

- A haute température/basse contrainte

Dans ce cas, les vitesses d'une dislocation vis et d'une dislocation coin s'écrivent :

$$v = 2 H l_0 \exp \left(-\frac{\Delta H_0}{kT} \right) \sinh \left(\frac{\Delta H_0}{kT} \sqrt{\frac{\tau_{vis}^*}{\tau_0}} \right) \quad \text{et} \quad v = 2 K v_0 \exp \left(-\frac{\Delta H_0}{kT} \right) \sinh \left(\frac{\Delta H_0}{kT} \sqrt{\frac{\tau_{coin}^*}{\tau_0}} \right)$$

Dans la mesure où la contrainte tend vers 0, le sinus hyperbolique peut être approché par son développement limité au premier degré. On trouve :

$$v = 2 H l_0 \exp \left(-\frac{\Delta H_0}{kT} \right) \left(\frac{\Delta H_0}{kT} \sqrt{\frac{\tau_{vis}^*}{\tau_0}} \right) \quad \text{et} \quad v = 2 K v_0 \exp \left(-\frac{\Delta H_0}{kT} \right) \left(\frac{\Delta H_0}{kT} \sqrt{\frac{\tau_{coin}^*}{\tau_0}} \right)$$

Les expressions des deux contraintes, τ_{vis} et τ_{coin} sont :

$$\tau_{vis} = \tau_0 \left(\frac{v}{2 H l_0 \exp \left(-\frac{\Delta H_0}{kT} \right)} \frac{kT}{\Delta H_0} \right)^2 + \tau_f \quad \text{et} \quad \tau_{coin} = \tau_0 \left(\frac{v}{2 K v_0 \exp \left(-\frac{\Delta H_0}{kT} \right)} \frac{kT}{\Delta H_0} \right)^2 + \tau_f$$

L'expression de la contrainte $\Delta \tau_{coin}$ qui découle de ces deux expressions est :

$$\Delta \tau_{coin} = \tau_{vis} - \tau_{coin} = \tau_0 \left(\frac{v}{2 H l_0 \exp \left(-\frac{\Delta H_0}{kT} \right)} \frac{kT}{\Delta H_0} \right)^2 - \tau_0 \left(\frac{v}{2 K v_0 \exp \left(-\frac{\Delta H_0}{kT} \right)} \frac{kT}{\Delta H_0} \right)^2$$

$$\Delta \tau_{coin} = \tau_0 \left(K^2 v_0^2 - H^2 l_0^2 \right) \left(\frac{v k T}{2 H l K v_0 \Delta H_0} \exp \left(\frac{\Delta H_0}{k T} \right) \right)^2$$