Service de Recherches de Métallurgie Physique

Thèse

présentée en vue d'obtenir le grade de Docteur de l'Université Paris-Sud XI (Orsay), spécialité « Physique du solide »

par

Sylvain Patinet

Durcissement par solution solide dans les alliages métalliques cubiques à faces centrées

Étude par simulation à l'échelle atomique du glissement des dislocations en solutions solides

Thèse soutenue le 10 décembre 2009 devant le jury composé de :

M.	David J. Bacon	Université de Liverpool	
Mme	Elisabeth Bouchaud	CEA	
M.	Laurent Pizzagalli	PhyMat-CNRS	(Rapporteur)
Mme	Louisette Priester	Université Paris 11	(Présidente)
M.	Laurent Proville	CEA	(Directeur)
M.	David Rodney	INPG-CNRS	(Co-directeur)
M.	Jean-Marc Roussel	Université Paul Cézanne	(Rapporteur)
M.	Georges Saada	ONERA-CNRS	

À Raymond Bienaimé, mon grand-père.

Remerciements

J'exprime mes profonds remerciements à mon directeur de thèse Laurent Proville pour l'aide et la grande compétence scientifique qu'il m'a apportées. En partageant sa passion scientifique, Laurent a su élever mon niveau d'exigence tout en m'apprenant l'humilité par rapport à notre travail. Il va de soi que le résultat de ce travail de thèse lui est en grande partie redevable.

Je tiens également à remercier mon co-directeur de thèse David Rodney pour son aide précieuse et son regard critique. Ses nombreux travaux scientifiques ont constitué une de mes principales sources d'inspiration.

Je remercie David J. Bacon, Elisabeth Bouchaud, Louisette Priester et Georges Saada d'avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse. Je pense que leurs questions et commentaires ont largement contribué à une soutenance de grande qualité. J'ai été en particulier très touché de l'honneur que m'ont fait Laurent Pizzagalli et Jean-Marc Roussel en acceptant de juger ce travail et d'en être les rapporteurs.

Mes remerciements les plus chaleureux vont à Daniel Bonamy pour m'avoir permis de réaliser ma première véritable collaboration scientifique en dehors de mon domaine de compétence. Je resterai profondément marqué par la qualité pédagogique et la disponibilité dont il a fait preuve pour m'initier aux formalismes des systèmes complexes.

Je tiens à remercier le directeur du Service de Recherches de Métallurgie Physique (SRMP) Michel Guttmann ainsi que son successeur François Willaime pour m'avoir donné la possibilité d'étudier au sein de leur laboratoire et pour m'avoir fait profiter de leurs connaissances scientifiques.

J'exprime aussi ma gratitude à l'équipe du SRMP. Je tiens plus particulièrement à remercier les chercheurs du laboratoire m'ayant aidé dans mes travaux de recherche par les nombreuses discussions sur des sujets éloignés de leurs propres travaux. Je ne citerai pas de noms ici de peur d'en oublier. J'éprouve un profond respect pour leur travail et leur parcours, ainsi que pour leurs qualités humaines.

Je voudrais adresser un remerciement particulier aux membres de l'équipe du SRMP pour lesquels les relations professionnelles ont évolué vers une amitié sincère. Les moments que nous avons vécus en dehors du laboratoire et les nombreuses conversations partagées avec eux m'ont rappelé combien le « monde extérieur » était aussi, voire plus important.

Je tiens également à remercier mes amis qui m'ont soutenu et ont compris à quel point une thèse pouvait être chronophage.

Je remercie ma famille pour l'amour qu'elle me porte ainsi que pour le goût des belles choses qu'elle a su me transmettre.

Mes remerciements les plus profonds vont naturellement à ma compagne Le San. Merci de m'avoir tenu la main jusqu'aux dernières lignes de ce mémoire. En plus de me supporter comme thésard pendant trois ans, tu acceptes les sacrifices qu'implique le métier de chercheur en m'autorisant à en faire mon métier. Merci d'être là tous les jours.

Les Lilas, 21 décembre 2009.

Table des matières

Table des matières 5

Préface 9

Introduction 13

1 Étude bibliographique 19
- 1.1 Résultats expérimentaux : phénoménologie du durcissement par solution solide . . . 21
  - 1.1.1 Effet de la température . . . 21
  - 1.1.2 Effet de la concentration . . . 26
- 1.2 Modélisation théorique du durcissement par solution solide . . . 29
  - 1.2.1 Modèles analytiques de la limite d'élasticité statique . . . 29
  - 1.2.2 Effet de taille et de module . . . 33
- 1.3 Simulation du durcissement par solution solide . . . 36
  - 1.3.1 Modélisation de dislocation comme une ligne élastique . . . 36
  - 1.3.2 Simulations atomistiques . . . 38
- Conclusion . . . 42

2 Dislocations dans les métaux cubiques à faces centrées 43
- 2.1 Méthode de simulation . . . 45
- 2.2 Géométrie des dislocations simulées . . . 47
  - 2.2.1 Cristallographie des dislocations . . . 47
  - 2.2.2 Structure de cœur des dislocations . . . 48
  - 2.2.3 Distance de dissociation des dislocations . . . 59
- 2.3 Forces de réseau : la contrainte de Peierls . . . 62
- 2.4 Tension de ligne des dislocations . . . 64
- Conclusion . . . 69

3 Description de l'interaction dislocation-soluté 71
- 3.1 Origines de l'ancrage d'une dislocation par un atome de soluté . . . 73
  - 3.1.1 Effet de taille . . . 73
  - 3.1.2 Effet de module . . . 74
  - 3.1.3 Effet Suzuki . . . 75
  - 3.1.4 Théorie élastique de l'interaction . . . 77
- 3.2 Force d'ancrage d'un obstacle . . . 80
  - 3.2.1 Calcul de la force d'ancrage . . . 80
  - 3.2.2 Influence de la position du soluté sur la force d'ancrage . . . 85

3.2.3 Influence de la distance entre soluté et plan de glissement sur la force d'ancrage 86
3.2.4 Force d'ancrage des paires de solutés 88
3.3 Portée d'interaction de l'ancrage 92
3.3.1 Calcul de la portée 92
3.3.2 Origine physique de la portée d'interaction 94
Conclusion 95

4 Activation thermique du franchissement d'un atome de soluté par une dislocation **97**
4.1 Temps d'attente de franchissement du soluté 99
4.1.1 Calcul du temps d'attente 99
4.1.2 Statistique du temps d'attente 101
4.2 Variation de l'enthalpie d'activation avec la contrainte 103
4.2.1 Variation du temps d'attente moyen en fonction de la température et de la contrainte appliquée 103
4.2.2 Calcul de l'enthalpie d'activation 105
4.2.3 Enthalpie d'activation déduite du paysage d'énergie interne 108
4.3 Propriétés dynamiques d'une dislocation en absence de soluté 110
4.3.1 Accélération d'une dislocation et calcul de sa masse effective 110
4.3.2 Vitesse stationnaire d'une dislocation et calcul du frottement effectif 112
4.4 Variation de la fréquence d'attaque avec la contrainte 115
4.4.1 Modèle de Friedel-Leibfried 116
4.4.2 Modèle de Granato 118
4.4.3 Modèle de Kramer unidimensionnel 118
Conclusion 120

5 Durcissement par solution solide **121**
5.1 Simulation du durcissement par solution solide 123
5.1.1 Calcul de la contrainte critique d'écoulement 123
5.1.2 Contrainte critique d'écoulement en fonction de la concentration 126
5.2 Analyse du durcissement par solution solide 128
5.2.1 Obstacles contribuant significativement au durcissement par solution solide 128
5.2.2 Comparaison entre approches théoriques et simulations . 132
5.2.3 Dissociation des dislocations en solution solide 136
5.3 Simulation de tension de ligne 139
5.3.1 Développement du modèle 139
5.3.2 Résultats du modèle de tension de ligne 149
Conclusion 151

6 Trajectoire d'une dislocation en solution solide **153**
6.1 Dynamique moyenne d'une dislocation en solution solide 155
6.2 Interfaces élastiques en présence d'un désordre gelé . 157
6.3 Topologie d'une dislocation au voisinage de la contrainte critique 159

6.4 Propagation d'une dislocation par dynamique d'avalanches . . . 163
6.4.1 Description des avalanches . . . 163
6.4.2 Statistiques des formes et des durées d'avalanches . . . 164
6.4.3 Transition de phase et limite d'écoulement . . . 167
Conclusion . . . 169

Conclusion générale **171**

A Annexes : Propriétés des matériaux simulés **175**
A.1 Potentiels interatomiques : Méthode de l'Atome Immergé . . . 177
A.2 Propriétés physiques des alliages simulés . . . 178

B Annexes : Effets de tailles et synthèse des obstacles **181**
B.1 Effets de tailles finies . . . 183
B.1.1 Effets des dimensions du système perpendiculaires à la ligne de dislocation . . . 183
B.1.2 Effets des dimensions du système le long de la ligne de dislocation . . . 187
B.2 Coefficients d'interaction des obstacles étudiés . . . 192
B.2.1 Géométries des obstacles étudiés . . . 192
B.2.2 Coefficients d'interaction des obstacles étudiés . . . 194

Bibliographie **195**

Notations **209**

Préface

Établir le lien entre l'échelle microscopique et le comportement mécanique macroscopique d'un matériau est un défi important de la physique du solide. En particulier, lorsqu'un matériau métallique est soumis à une sollicitation mécanique, il existe un seuil de contrainte pour lequel la déformation du solide est irréversible. L'identification des mécanismes microscopiques responsables de l'existence de cette limite, dite d'élasticité, est cruciale car elle entre en jeu dans la conception et le dimensionnement de toutes les structures métalliques.
Une déformation permanente se traduit au niveau atomique par la mise en mouvement et la multiplication des dislocations, c'est-à-dire par une déformation plastique du matériau. Dès lors, empêcher le mouvement des dislocations revient à accroître la limite d'élasticité et donc à durcir le métal. Si les différentes barrières affectant la mobilité des dislocations sont connues, la prédiction quantitative de la limite d'élasticité résultant de phénomènes multi-échelles demeure une des difficultés majeures dans la description de la plasticité.
La limite d'élasticité d'un matériau provient de la superposition des obstacles aux mouvements des dislocations. Ces obstacles sont classiquement constitués par les joints de grains des polycristaux, les précipités ainsi que les dislocations elles-mêmes. Leur présence implique des inhomogénéités importantes pouvant conduire à la fragilisation du métal. Une autre technique métallurgique de durcissement consiste à incorporer à la matrice des éléments d'alliage. Ces solutés forment, une fois en solution, des points d'ancrage pour les dislocations. Ce phénomène de durcissement par solution solide permet, notamment dans les métaux cubiques à faces centrées, d'augmenter la limite d'élasticité sans perte notable de ductilité.

Le durcissement par solution solide a fait l'objet de nombreux travaux depuis les années 1960 tant d'un point de vue expérimental que théorique. Expérimentalement les études ont porté sur la variation de la limite d'élasticité d'alliages binaires sous forme de monocristaux en fonction de la température et de la concentration en soluté. Les travaux de Fleischer (1963) et Haasen (1979) concernant les alliages de métaux nobles ont permis de mettre en évidence dans l'interaction dislocation-soluté les effets de taille et de module sur le durcissement observé. En revanche, la comparaison quantitative des durcissements entre alliages de matrices différentes demeure un problème non résolu.
D'un point de vue fondamental, les théories classiques du durcissement

par solution solide développées par Friedel (1964), Labusch (1970) et Nabarro (1985) considèrent une dislocation comme une ligne continue à laquelle sont associés une énergie de ligne et un champ élastique. La description d'une dislocation en tant que ligne élastique franchissant des obstacles par activation thermique a permis de comprendre un grand nombre de phénomènes. Toutefois, il a été montré expérimentalement que le taux de durcissement dans une solution solide cubique à faces centrées varie d'un alliage à l'autre sans qu'il ait été possible d'identifier l'origine de cette variation. L'augmentation de la contrainte d'écoulement peut ainsi varier d'une loi en racine carrée à une loi linéaire de la concentration en soluté. La statistique de durcissement propre à un alliage est identifiée par un ajustement des données expérimentales sur les diverses approches théoriques. Cette démarche a posteriori n'est pas satisfaisante.

Dans une solution solide cubique à faces centrées, pour laquelle la dislocation est dissociée et où la teneur en soluté est de quelques % atomiques, le modèle continu n'est plus approprié. En effet, pour cette gamme de concentration, de nombreux atomes de soluté ne sont pas isolés et le ruban de faute d'empilement qui sépare les deux dislocations partielles est décoré de nombreux atomes de soluté. Il est donc problématique de considérer une dislocation parfaite rencontrant des solutés isolés et ce d'autant plus que, dans le plan de glissement, la distance moyenne entre atomes de soluté est nettement inférieure à la distance de dissociation des dislocations partielles. En outre, la description élastique linéaire de l'interaction des solutés avec le cœur de la dislocation, siège de grandes déformations, est erronée. Il apparaît donc opportun de réexaminer au niveau atomique ces questions de base en utilisant la simulation numérique qui permet de modéliser la géométrie du cœur des dislocations. Rodary et al. (2004) et Olmsted et al. (2006) ont ainsi réalisé les premières études par dynamique moléculaire du durcissement par solution solide pour les alliages cubiques à faces centrées de Ni(Al) et Al(Mg). Le seuil de glissement ainsi que l'amortissement effectif de la dislocation ont été estimés en fonction de la concentration en soluté dans ces alliages modèles. Ces simulations ont notamment mis en évidence le fait que la température affecte considérablement la limite d'élasticité d'un matériau. Elles ont montré de plus que dans une solution solide une relation de proportionnalité lie la force exercée sur une dislocation à sa vitesse stationnaire comme dans un métal pur. Récemment, Proville et al. (2006) ont étudié par simulation d'une dislocation coin dans l'alliage de Ni(Al) l'origine du taux de durcissement en fonction de la concentration. Ils ont attribué le durcissement linéaire observé dans ce système à un effet des paires de soluté.

Le bilan des travaux précédemment entrepris montre que le phénomène de durcissement par solution solide est clairement caractérisé. La variation de la limite d'élasticité observée expérimentalement avec la concentration en soluté et la température a été modélisée théoriquement et reproduite par simulation. Néanmoins, les différentes approches développées font appel le plus souvent à des ajustements et restent cantonnées à un niveau qualitatif ne permettant pas la comparaison entre alliages de

matrices différentes. C'est ce qui justifie les travaux entrepris dans cette thèse dont l'objectif est d'améliorer la description théorique du durcissement par solution solide dans les métaux cubiques à faces centrées.

Pour ce faire, nous avons mis en œuvre des simulations atomistiques du glissement d'une dislocation dans une solution solide. Nous profitons des opportunités données par les techniques numériques pour comparer deux alliages aux propriétés physiques différentes, Ni(Al) et Al(Mg), pour lesquels nous disposons d'études préalables. Nos simulations portent également sur la comparaison des différents types de dislocations glissiles : coin et vis. Nous avons cherché par cette démarche de comparaison à enrichir notre compréhension du durcissement par solution solide en éprouvant les prédictions des modèles théoriques et leurs cohérences vis-à-vis des simulations ainsi que des résultats expérimentaux.

Dans le premier chapitre, nous présentons la physique du durcissement par solution solide en synthétisant les résultats expérimentaux, les approches théoriques courantes ainsi que les simulations précédemment réalisées. Dans la suite de ce mémoire, nous présentons nos contributions scientifiques concernant la modélisation et la simulation du durcissement par solution solide dans les alliages de Ni(Al) et Al(Mg). Avant d'étudier l'interaction dislocation-soluté, nous décrivons (chapitre 2) les propriétés élémentaires des dislocations dans les matrices métalliques pures de Ni et d'Al. Nous déterminons la structure des cœurs de dislocation, la contrainte de Peierls ainsi que la tension de ligne effective d'une dislocation. Ces propriétés des dislocations nous servent de base physique pour comprendre l'interaction entre dislocation et obstacle.
En vue d'identifier l'origine du durcissement par solution solide, nous nous sommes focalisés sur une configuration mettant en présence une seule dislocation de type coin ou vis avec un atome de soluté isolé. Tout d'abord (chapitre 3), nous avons déterminé par simulations statiques les forces d'ancrage et la portée d'interaction caractérisant un obstacle en fonction de sa position. Ces mesures constituent les paramètres élémentaires des modèles analytiques de durcissement dans la limite d'une température nulle. Par la suite (chapitre 4), nous nous sommes intéressés au régime de décroissance de la limite d'élasticité avec la température. Pour cela, nous avons étudié par dynamique moléculaire le mécanisme d'activation thermique du franchissement d'un atome de soluté par une dislocation.
Puisque les situations réelles mettent en jeu une dislocation dans une solution solide, nous avons simulé (chapitre 5) par relaxation statique l'interaction d'une dislocation avec une population d'atomes de soluté distribués aléatoirement. Nous calculons les contraintes d'écoulement en fonction de la concentration en soluté pour les deux types de dislocations coin et vis dans les deux alliages modèles. Les résultats de simulations sont comparés aux résultats expérimentaux ainsi qu'aux différentes approches théoriques.
Finalement (chapitre 6), nous traitons du problème de la dynamique d'une dislocation sous contrainte en solution solide et à température finie. Nous simulons par dynamique moléculaire le glissement d'une dislocation en

solution solide pour différentes contraintes appliquées au système. Ces trajectoires sont caractéristiques de la dynamique d'interface élastique en milieux aléatoires. Nous étudions en particulier le comportement critique de la dislocation près du seuil de dépiégeage pour lequel la vitesse de la dislocation tend à s'annuler. La topologie de la dislocation ainsi que sa dynamique sont caractérisées par des exposants non triviaux que nous calculons directement à partir des simulations.

Cette thèse a fait l'objet de divers travaux écrits : un article de journal paru (Patinet et Proville 2008), un article de journal soumis pour publication (Patinet et Proville 2009a), deux articles de journaux en cours de rédaction (Patinet et Proville 2009b, Patinet et al. 2009), un acte de conférence (Patinet 2008) ainsi que deux notes techniques au Commissariat à l'Énergie Atomique (Patinet et Proville 2007, Tchoufag et al. 2009).

Introduction

Enjeux et motivations

Le dimensionnement d'une structure métallique fait partie intégrante de sa conception (Philibert et al. 2002). En effet, toute structure entre dans un contexte d'utilisation dans lequel elle doit résister à certaines sollicitations mécaniques. Un des enjeux de la conception est donc de garantir un niveau de fiabilité et de sûreté. Pour répondre à cette problématique, il existe plusieurs solutions techniques. Par exemple, il est possible d'augmenter la résistance d'une structure en agrandissant simplement cette dernière. Cependant ce surdimensionnement n'est en général pas souhaitable car il alourdit la structure et augmente son coût. Une deuxième solution consiste à choisir des matériaux intrinsèquement plus résistants, c'est-à-dire qui possèdent de meilleures propriétés mécaniques, comme la limite d'endurance, la résistance maximale à la rupture, la ductilité et la limite d'élasticité (François et al. 1995).

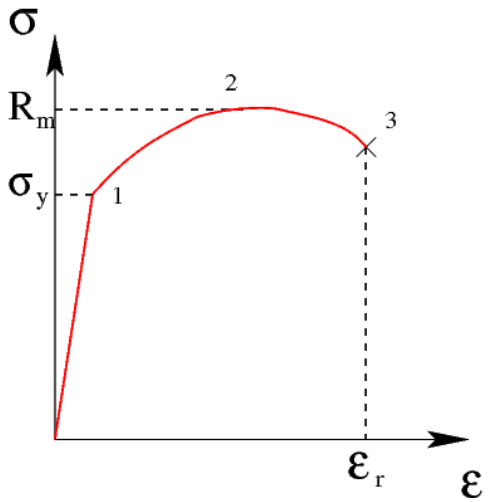


Figure 1 – *Contrainte en fonction de la déformation pour une courbe de traction schématique. 1 : limite d'élasticité σ_y, 2 : résistance à la traction R_m, 3 : déformation à la rupture ε_r.*

Un grand nombre des propriétés mécaniques d'un métal peuvent être déduites d'un essai mécanique de traction comme reporté schématiquement sur la figure 1. Nous pouvons classer ces différentes propriétés en deux catégories en fonction de leur contexte d'utilisation qui peut être courant ou accidentel lors de la rupture. Dans le cas d'événements accidentels, il est souhaitable de disposer de métaux ductiles pour lesquels les fissures se propagent de manière stable évitant les risques d'explosion. Cette propriété se traduit sur la figure 1 par un allongement à la rupture

ϵ_r important à la fin de l'essai de traction. Dans un mode courant d'utilisation, les matériaux doivent supporter une contrainte et retrouver leur forme initiale après chaque sollicitation. La limite d 'élasticité σ_y reportée sur la courbe de traction caractérise le seuil de contrainte à partir duquel les matériaux se déforment de manière permanente. σ_y est par conséquent un paramètre important puisqu'il définit un seuil d'irréversibilité à la déformation. Durcir un matériau métallique revient à accroître sa limite d'élasticité.
Au niveau atomique la limite d'élasticité est liée à la mobilité des dislocations. Ces dernières sont le vecteur de la déformation plastique des métaux. Il y a déformation plastique lorsque les dislocations se mettent en mouvement et se multiplient. Le niveau de dureté d'un métal provient donc de l'ancrage de ses dislocations. Plus les dislocations sont bloquées plus le métal est dur. Il existe plusieurs possibilités pour durcir un métal suivant les types d'obstacles rencontrés par les dislocations. Les différents types d'obstacles peuvent être rangés par ordre décroissant d'effet durcissant : les joints de grains (Hall 1951, Petch 1953), les précipités (Kelly et Nicholson 1963, Murayama et Hono 1999), les dislocations elles-mêmes (Kuhlmann-Wilsdorf 1999) et les atomes d'impureté en solution solide (Jax et al. 1970).

Un des problèmes dans l'obtention de matériaux durs est qu'il existe un fort couplage entre dureté et fragilité. Le phénomène d'écrouissage où la multiplication des dislocations empêche leur propagation est l'exemple caractéristique du couplage entre ces deux propriétés. Plus un métal est déformé plastiquement plus il est dur et dans le même temps moins il devient déformable (François et al. 1995). Un autre exemple connu dans le contexte de l'industrie nucléaire provient du durcissement causé par les défauts provenant des dégâts d'irradiation. Ces défauts ancrent les dislocations mais fragilisent également les matériaux de structure (Farrell et al. 2004, Nogaret et al. 2008). Dans une perspective de dimensionnement, l'idéal est alors de disposer de matériaux durs et ductiles à la fois. De ce point de vue, les métaux cubiques à faces centrées (CFC) sont intéressants car ils sont les métaux les plus ductiles avec les métaux hexagonaux compacts (HCP). Pour ces métaux, le durcissement par solution solide substitutionnelle est une bonne solution pour augmenter la limite d'élasticité car il ne diminue pas la ductilité de façon notable. Ici, c'est la mise en solution d'impuretés à la place des atomes de la matrice qui bloque les dislocations et augmente la limite d'écoulement. Ce mode de durcissement peut même parfois accroître la déformation à la rupture (Ayeres 1979) et modifier notablement l'efficacité des autres processus de durcissement. De plus, il reste souvent efficace jusqu'à une température supérieure à la température de restauration.

Bien que le phénomène de Durcissement par Solution Solide (DSS) ait été le sujet d'études expérimentales depuis plusieurs décennies, sa compréhension fine fait encore l'objet de nombreux débats. En conséquence, pour pouvoir développer un alliage CFC de haute limite d'élasticité, il est souvent nécessaire de multiplier les expériences coûteuses car nous ne disposons pas d'une approche théorique quantitative. En effet la mo-

délisation du DSS se heurte à plusieurs difficultés. Premièrement, il est difficile de discriminer les différentes théories du DSS à partir des expériences du fait d'une gamme de concentration limitée de solutés en solution solide. Une seconde difficulté provient de l'interprétation des expériences elles-mêmes. Bien que les expériences de DSS de référence aient été effectuées sur des monocristaux jusqu'à une température cryogénique, la déformation plastique est souvent hétérogène. Si nous ajoutons les effets des surfaces et les phénomènes de vieillissement des métaux, l'interprétation de la mesure de contrainte d'écoulement expérimentale est particulièrement ardue. Ces difficultés contraignent à émettre des hypothèses et à ajuster les paramètres des lois théoriques, ce qui altère la prédictibilité du DSS.

Dans ce contexte, les méthodes de simulation à l'échelle atomique constituent une opportunité car elles permettent de traiter explicitement certains phénomènes clés du DSS. Il est ainsi possible de simuler l'interaction non-linéaire et anisotrope entre le cœur des dislocations et les atomes de soluté. Plusieurs méthodes de simulation atomistique existent, se partageant entre les méthodes de structure électronique et les méthodes utilisant des potentiels interatomiques empiriques. Si les premières décrivent quantitativement un grand nombre de propriétés physiques, elles sont gourmandes en puissance de calcul et ne permettent pas d'envisager pour l'instant la simulation d'une dislocation dans une solution solide. Les simulations de dynamique moléculaire (DM) utilisant des potentiels interatomiques offrent en revanche un bon compromis entre le coût de calcul et le niveau de détail nécessaire à la modélisation physique du DSS. Grâce à la capacité actuelle des calculs, il est désormais envisageable de réaliser des études statistiques au niveau atomique par DM pour des tailles de systèmes et des temps de simulations allant jusqu'à plusieurs centaines de milliers d'atomes sur des trajectoires de quelques dizaines de nanosecondes (Yip 2005). En outre, elles permettent de modéliser des systèmes idéaux utiles pour la compréhension et le développement théorique du DSS. C'est le cas par exemple des simulations dites statiques. En modélisant une expérience fictive à température nulle, elles nous donnent accès aux configurations stables du système et éliminent artificiellement les effets thermiques. De plus, les simulations nous permettent d'étudier le cas idéal d'une véritable solution solide parfaitement aléatoire comme il est supposé dans les modèles théoriques. Enfin, il est possible de s'affranchir des effets de la microstructure en simulant une unique dislocation isolée sans interaction avec d'autres dislocations ou avec des joints de grains.
Toutefois, la méthode de DM nécessite l'ajustement des potentiels interatomiques sur certaines propriétés physiques des matériaux et l'emploi d'une interaction ad hoc entre atomes. Leur description n'est pas toujours valide en dehors des paramètres ajustés ce qui peut conduire dans des cas critiques à une description physique erronée comme par exemple celui de la structure de cœur des dislocations dans les métaux cubiques centrés (CC) (Ventelon 2008). Au contraire, dans les métaux CFC, les potentiels interatomiques ont montré une plus grande robustesse. Ils reproduisent de manière satisfaisante les propriétés des métaux de transition (Daw

et al. 1993) et ont été employés pour décrire les dislocations dans de nombreuses études. De plus, les dislocations des métaux CFC possèdent une très faible force de réseau et un plan de glissement univoque. Ces propriétés rendent plus aisée l'étude du DSS car les forces significatives s'opposant aux mouvements des dislocations se calculent par rapport à un seul plan de glissement et proviennent seulement des atomes de solutés. Nous pouvons ainsi envisager de tester et d'améliorer la fiabilité des théories du DSS existantes dans les métaux CFC. C'est ce qui motive principalement les travaux présentés dans ce mémoire de thèse.

Outre la compréhension du phénomène de DSS en lui-même, les simulations atomiques peuvent également servir à d'autres approches comme la modélisation multi-échelle. Par exemple, les calculs de simulations atomistiques sont parfois utilisés comme paramètres d'entrée dans des simulations mésoscopiques de Dynamique des Dislocations Discrètes (DDD) (Chen et al. 2008).

D'autre part, ces simulations sont également l'occasion d'améliorer la compréhension du comportement mécanique d'alliages industriels (Li et al. 2009). Ces derniers doivent toutefois rester proches d'alliages binaires modèles pour lesquels nous disposons à la fois de potentiels interatomiques fiables et de données expérimentales suffisamment nombreuses. Notre choix s'est porté sur les solutions solides d'aluminium-magnésium et de nickel-aluminium respectant ces deux conditions. L'alliage d'Al(Mg) est notamment utilisé dans l'industrie automobile. Il a l'avantage d'être léger, ductile et son comportement mécanique a fait l'objet de nombreuses études expérimentales (Picu et al. 2006, Horvath et al. 2007) et théoriques (Olmsted et al. 2006, Soare et Curtin 2008). De plus, il a été observé que la recristallisation de cet alliage augmentait avec la concentration en magnésium (Gubicza et al. 2004). L'alliage de Ni(Al) est également intéressant industriellement car il modélise une des phases des Superalliages à base de nickel connus pour leurs bonnes propriétés de fluage à haute température (Rae et Reed 2007). Ces matériaux sont en plus dotés d'une certaine résistance à l'oxydation et à la corrosion à chaud et servent en particulier à la fabrication des aubes de turbine. Bien que leurs propriétés mécaniques intéressantes ne soient pas directement dues à l'effet de DSS, ces matériaux comportent une phase γ de solution solide CFC qu'il faut pouvoir caractériser. Cet alliage a également fait l'objet de nombreuses expériences (Nordstrom et Barett 1972) et de multiples études par simulations (Rodary et al. 2004, Proville et al. 2006).

Objectifs et approche générale

Afin de développer de nouveaux alliages performants, il est nécessaire d'améliorer nos connaissances du DSS en tentant de répondre aux problématiques existantes. L'objectif à long terme est d'être en mesure de prédire la limite d'élasticité des alliages CFC de manière quantitative.
Nous nous intéressons dans un premier temps aux différents travaux de la littérature. Les approches théoriques, les approches expérimentales et les méthodes de simulations révèlent une grande richesse ainsi qu'une im-

portante complexité. Leur synthèse nous permet d'identifier les questions encore ouvertes dans l'étude du DSS. Nous décrivons les résultats des approches théoriques qui ont permis de comprendre une partie importante des observations expérimentales au travers notamment de la description de l'origine de l'ancrage des dislocations. La revue des modèles existants est l'occasion d'identifier les paramètres décrivant le DSS qu'il va nous falloir calculer. Nous exposons les simulations de DSS déjà entreprises et les résultats obtenus précédemment dans la littérature par les approches de lignes élastiques (modèle de tension de ligne et DDD) et les approches atomistiques (DM et calcul de structure électronique). Cette étude bibliographique présente les outils dont nous disposons pour tenter d'apporter certaines réponses aux questions laissées en suspens.

Les simulations nous permettent de tester la cohérence des théories du DSS et de justifier physiquement leurs hypothèses. La formulation des théories du DSS fait par exemple intervenir les forces d'ancrage des solutés permettant le calcul de la résistance au glissement des dislocations. Grâce aux simulations atomistiques nous pouvons calculer cette force d'ancrage tout en prenant en compte la nature discrète et non-linéaire de l'interaction entre dislocation et soluté. Nous profitons également des opportunités du calcul pour étudier l'influence de la dissociation des dislocations ou pour tester les hypothèses des modèles comme le cadre théorique d'une solution solide parfaitement aléatoire. En effet comme la vitesse de trempe n'est pas infinie lors de la synthèse d'un alliage, il existe toujours expérimentalement un certain vieillissement de la solution solide.

Pour chaque étape de notre étude, nous commençons par des simulations de relaxation statique (modélisant une température fictive nulle) et seulement ensuite par des simulations de dynamique moléculaire en température. En effet les simulations statiques sont moins coûteuses en temps de calcul. Ces simulations nous donnent accès à la contrainte d'écoulement à température nulle et sont un préalable qu'il est nécessaire de comprendre avant d'ajouter la complexité due à la température. Elles permettent enfin une comparaison des différents systèmes dont la température, sauf exception, ne devrait pas inverser les tendances. Cette démarche est réalisée à chaque étape pour les dislocations coin et vis dans les deux types d'alliages de matrices différentes Ni(Al) et Al(Mg). Nous disposons donc de quatre systèmes modèles dont la comparaison nous permet d'enrichir notre compréhension du DSS.

Les simulations entreprises dans nos travaux suivent un ordre croissant de complexité. Les premières simulations présentées dans ce mémoire concernent la caractérisation des propriétés des dislocations isolées dans les matrices CFC pures de Ni et Al. Pour pouvoir comprendre l'interaction entre les différents types de dislocations et les atomes de solutés, la contrainte de Peierls et la structure de cœur des dislocations sont calculées. Nous calculons également la rigidité des dislocations qui pilote leur forme une fois ancrées sur les impuretés.
Dans un deuxième temps, nous nous intéressons au mécanisme de base du DSS en étudiant l'interaction entre une dislocation et un soluté isolé. Nous

identifions l'origine de l'ancrage des dislocations par les solutés et calculons son intensité ainsi que sa portée d'interaction. Ces mesures servent de paramètres d'entrée pour les modèles de DSS.
La relative simplicité du système dislocation-soluté isolé nous permet d'étudier par simulation de dynamique moléculaire le franchissement en température d'un obstacle par une dislocation. L'activation thermique du franchissement d'un obstacle est caractéristique du régime de décroissance de la contrainte d'écoulement avec la température.
Nous nous penchons ensuite sur le phénomène de DSS à proprement parler. Nous mesurons la contrainte d'écoulement d'une dislocation en solution solide en fonction de la concentration en soluté. Ces simulations atomistiques statiques sont comparées aux prédictions des différents modèles analytiques pour lesquels nous avons préalablement calculé les paramètres d'entrée. Afin d'identifier les paramètres pertinents décrivant le DSS, nous réalisons également des simulations de lignes élastiques continues reproduisant les caractéristiques physiques des simulations atomistiques. Nous cherchons par ces simulations basées sur l'approximation de tension de ligne à reproduire les résultats atomistiques et à comparer les alliages de matrices différentes.
Enfin, nous réalisons des simulations de dynamique moléculaire de glissement d'une dislocation en solution solide soumise à plusieurs niveaux de contrainte. Nous analysons alors la géométrie et la dynamique d'une dislocation glissant dans une solution solide près du seuil critique, c'est-à-dire lorsque la vitesse de la dislocation tend à s'annuler. Cette dernière étude correspond aux comportements des dislocations en solution solide entre deux événements d'ancrages.

Étude bibliographique

1

Sommaire

1.1 Résultats expérimentaux : phénoménologie du durcissement par solution solide 21
1.1.1 Effet de la température 21
1.1.2 Effet de la concentration 26
1.2 Modélisation théorique du durcissement par solution solide 29
1.2.1 Modèles analytiques de la limite d'élasticité statique . . . 29
1.2.2 Effet de taille et de module 33
1.3 Simulation du durcissement par solution solide 36
1.3.1 Modélisation de dislocation comme une ligne élastique . . 36
1.3.2 Simulations atomistiques 38
Conclusion 42

Ce chapitre introductif a pour but de présenter le phénomène du durcissement par solution solide (DSS) à travers les résultats scientifiques précédant nos travaux.
Dans un premier temps, nous décrivons le phénomène de DSS à travers les résultats expérimentaux. La variation de la contrainte d'écoulement est étudiée en fonction de la température et de la concentration en atomes de soluté. Par la suite, nous présentons les modélisations théoriques du DSS à travers une revue des différents modèles existants. Cette revue est l'occasion d'identifier les paramètres physiques pertinents dans la description de l'interaction entre atome de soluté et dislocation pilotant le DSS. Enfin, les résultats précédemment obtenus par simulation sont synthétisés au travers des approches numériques principales : simulations de lignes élastiques continues et simulations atomistiques.
En soulignant à chaque étape de cette synthèse bibliographique les questions restées ouvertes, nous justifions notre approche ainsi que les méthodes qui vont être mises en œuvre dans ce mémoire de thèse.

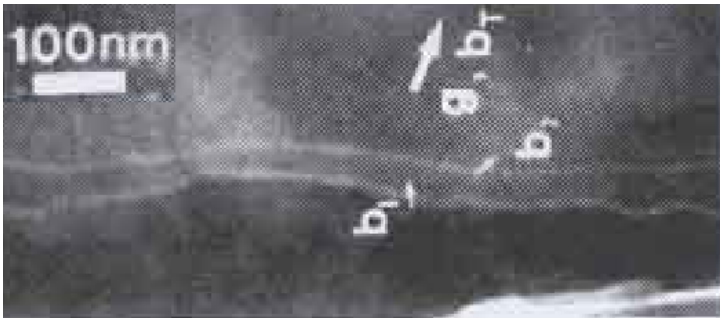


FIGURE 1.1 – *Micrographie de microscopie électronique en transmission d'une dislocation dissociée dans un alliage de Cu-8%Si d'après Saka (1985). Interagissant avec les atomes de soluté, la dislocation présente un profil sinueux dans le cristal.*

1.1 Résultats expérimentaux : phénoménologie du durcissement par solution solide

Dans la synthèse présentée ici nous ne prétendons pas exposer le phénomène de DSS de manière systématique. Nous orientons pour cela le lecteur vers les excellentes revues réalisées par Butt et Feltham (1978), Haasen (1979), Butt et Feltham (1993) et Argon (2007). Nous résumons simplement les grands aspects phénoménologiques du DSS en pointant les questions qui restent en suspens dans la compréhension du DSS. Nous présentons dans un premier temps l'effet de la température, puis l'effet de la concentration en soluté sur la contrainte d'écoulement d'une solution solide. Les effets de la température et de la concentration en soluté sont illustrés par les mesures réalisées sur un alliage monocristallin d'Al(Mg) reportées sur la figure 1.2. Les résultats expérimentaux qualitativement semblables des métaux HCP sont également exposés bien que ce mémoire de thèse soit centré sur l'étude du DSS des alliages CFC substitutionnels. Enfin, lorsque ce n'est pas précisé, les expériences relatées concernent des alliages sous forme de monocristaux et la limite d'élasticité ou contrainte d'écoulement correspond à la contrainte critique résolue (CCR).

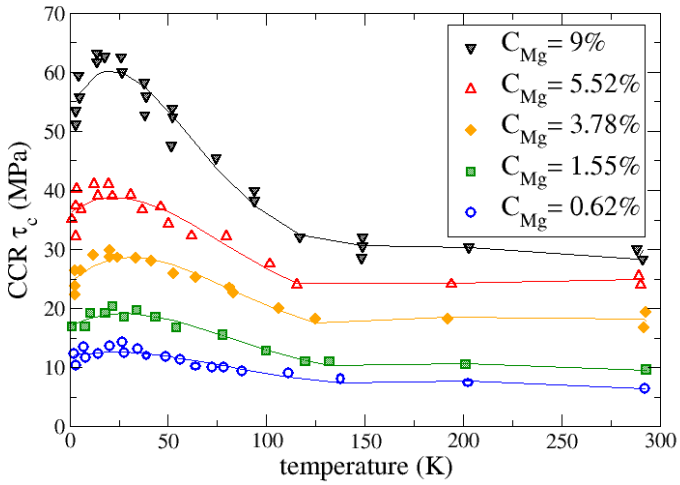


Figure 1.2 – *Variation de la contrainte d'écoulement en fonction de la température d'un alliage monocristallin d'Al (Mg) pour plusieurs concentrations d'après Podkyuko et Pustovalov (1978).*

1.1.1 Effet de la température

Lors d'un essai de traction, la limite d'élasticité est fonction de la température et de la vitesse de déformation imposée comme indiqué schématiquement sur la figure 1.3. L'origine physique d'un tel comportement tient, dans le cas du DSS, au franchissement des solutés par les dislocations sous l'effet de l'activation thermique. En effet, il est possible d'associer une barrière énergétique aux impuretés empêchant le mouvement des dislocations, laquelle est franchie sous l'action des fluctuations thermiques. La tendance la plus généralement observée expérimentalement

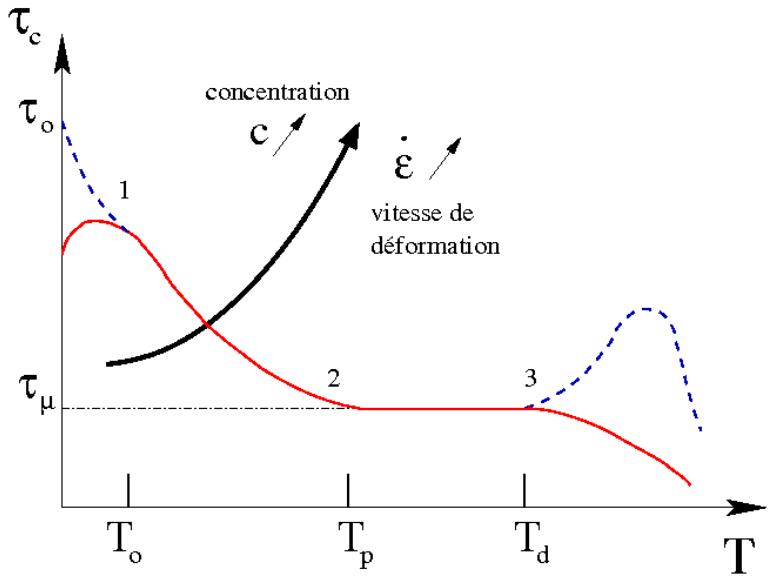


FIGURE 1.3 – *Variation schématique de la contrainte d'écoulement en fonction de la température d'un alliage monocristallin cubique à faces centrées. La contrainte extrapolée à température nulle, τ_0, ainsi que la contrainte athermique, τ_μ, sont reportées sur les axes du graphique. Les températures T_p et T_d représentent les limites du régime thermiquement activé, du régime athermique et du régime de hautes températures. À basse température, jusqu'à T_0, il est possible d'observer une anomalie où la contrainte d'écoulement augmente avec la température.*

pour une vitesse de déformation imposée constante est reportée en traits continus sur le graphique 1.3. Elle présente la diminution de la contrainte d'écoulement avec la température et son augmentation avec la vitesse de déformation (Butt et al. 1986, Wendt et Wagner 1982). Nous constatons que la variation de la contrainte d'écoulement n'est pas monotone. Il existe plusieurs régimes de températures délimités sur la figure 1.3 par les points numérotés et les températures correspondantes : un régime thermiquement activé comportant une anomalie aux basses températures, un régime athermique et un régime des hautes températures.

Régime thermiquement activé $T = 0 \rightarrow T_p$

Le régime thermiquement activé s'étend d'une température nulle à la température de plateau T_p d'environ $T_f/3$ ($\approx$ 300K) avec T_f la température de fusion de l'alliage. Plus la température augmente, plus il est facile pour les dislocations de franchir les barrières formées par les atomes de soluté. En effet, c'est l'énergie thermique qui aide au franchissement des obstacles. La limite d'élasticité diminue donc avec la température. Le cadre théorique naturel pour traiter de cette activation thermique est celui de la théorie de l'état de transition (TST). Dans le contexte d'un essai mécanique de traction, elle permet d'écrire la vitesse de déformation $\dot{\epsilon}$ ($\approx 10^{-4}s^{-1}$) comme :

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}_0 e^{-\Delta H/kT}, \tag{1.1}$$

avec ΔH la barrière d'énergie caractéristique dépendant de la contrainte appliquée, k la constante de Boltzmann et T la température. Le facteur

pré-exponentiel $\dot{\epsilon}_0$ ($\approx 10^7 s^{-1}$) peut s'interpréter comme une fréquence de franchissement moyenne des obstacles. Il est fonction de la densité de dislocations mobiles, de la distance moyenne entre sites thermiquement activables au sein du métal ainsi que d'une fréquence atomique caractéristique. Les expériences de DSS pour les alliages CFC donnent généralement une valeur de l'ordre de $\ln(\dot{\epsilon}_0/\dot{\epsilon}) \approx 25$.
Au travers de l'équation 1.1 la propagation d'une dislocation dans une solution solide peut être vue comme un processus de diffusion. Dans cette perspective, l'avancée de la dislocation est le produit de la probabilité pour qu'elle franchisse un obstacle d'énergie ΔH avec une fréquence d'essai de franchissement $\dot{\epsilon}_0$. Cette description permet de rendre compte à la fois de la décroissance de la contrainte d'écoulement avec la température mais également de son accroissement avec la vitesse de déformation. De nombreuses études expérimentales révèlent que dans la plupart des alliages CFC, la contrainte d'écoulement décroît comme $T^{2/3}$ (Koppenaal et Fine 1962, Akhtar et Teghtsoonian 1972). Si cette variation nous aide à établir le lien existant entre la contrainte d'écoulement et la barrière d'énergie à franchir, en revanche elle nous donne peu d'informations quant à la nature de la barrière effective. Certains auteurs suggèrent que cette barrière caractéristique peut être formée d'obstacles isolés constitués par des paires ou des triplets d'atomes de soluté (Wille et al. 1987) quand d'autres évoquent un ancrage collectif le long de la dislocation (Butt et Feltham 1993). Enfin au lieu d'un seul type d'obstacle caractéristique de l'interaction, Neuhauser et al. (1977) considèrent l'hypothèse d'une résistance aux mouvements des dislocations constituée par une distribution statistique d'obstacles différents.

Anomalie aux basses températures $T = 0 \rightarrow T_0$

Cette anomalie de basses températures a été observée dans de nombreux systèmes (Suzuki et al. 1991), sa température d'apparition T_0 se situant en moyenne autour de $70K$. Le terme anomalie vient du fait qu'on observe une contrainte d'écoulement augmentant avec la température contrairement au phénomène d'activation thermique décrit précédemment. Notons qu'elle peut prendre des formes différentes de celle reportée sur la figure 1.3 en trait discontinu (Parkhomenko et Pustovalov 1982).

Il existe plusieurs explications concernant l'origine de cette anomalie. La plus généralement admise consiste à considérer un phénomène d'inertie des dislocations (Suzuki et al. 1991, Argon 2007). Selon cette description, les forces de friction dues à l'interaction entre phonons et dislocations diminuent en abaissant la température. À température cryogénique, la dislocation peut donc accélérer entre deux obstacles. Lors de l'interaction avec les obstacles, elle possède alors une certaine énergie cinétique lui permettant de franchir les obstacles plus aisément. Par conséquent, la barrière d'énergie effective est augmentée avec la température du fait du ralentissement des dislocations. Cet effet d'inertie sera effectif d'autant plus que les frictions seront faibles. Il opère donc seulement à basse température. Ce mécanisme inertiel à notamment été modélisé dans les travaux de Granato (1971).

Une interprétation différente de ce phénomène est d'attribuer l'origine de l'abaissement de la limite d'élasticité à un effet thermomécanique (Basinski 1957, Kubin et al. 1982, Estrin et Kubin 1991, Molinari et al. 1993). En effet à basse température, la conductivité thermique décroît en diminuant la température. Or lorsqu'une dislocation se décroche d'un obstacle et glisse, elle dissipe de l'énergie par frottements sous forme de chaleur. À basse température, la faible conductivité thermique du métal empêche alors la dissipation de cette énergie thermique provoquant un échauffement localisé. Par conséquent, du fait du mécanisme d'activation thermique, la contrainte critique locale d'ancrage des dislocations diminue participant à la diminution de la contrainte d'écoulement. Cette hypothèse a néanmoins été remise en cause expérimentalement par Parkhomenko et Pustovalov (1982).
L'existence de cette anomalie de basse température est également discutée en termes d'effets quantiques. Schwarz et al. (1977) ont mis en évidence expérimentalement cet effet en observant une diminution de la contrainte d'écoulement lors du passage d'un état normal à un état supraconducteur dans les alliages de Pb(Sn) et Cu(Al). Pour ce faire, ils réalisent à une même température des expériences de friction interne dans les deux états, normal et supraconducteur, à l'aide d'un champ magnétique extérieur. L'interprétation de ces expériences est la même que celle décrite pour les effets inertiels. À la place du frottement d'origine phononique, c'est ici le frottement d'origine électronique qui diminue provoquant les effets inertiels décrits précédemment. Toutefois, Alers et al. (1969) ont remis en cause cette interprétation inertielle à partir d'expériences similaires. Ils n'observent pas d'effet de la vitesse de déformation de l'essai mécanique pouvant pourtant entrer en jeu dans une interprétation inertielle. Enfin, dans les discutions concernant cet effet, nous notons que certains auteurs formulent l'hypothèse d'un effet tunnel pour expliquer cette anomalie notamment dans les métaux cubiques centrés (Petukhov 2007). Il n'est toutefois opérant qu'à très basse température dans les métaux faiblement alliés.

Régime athermique $T = T_p \to T_d$

Le régime athermique se caractérise par une contrainte τ_μ, dite de plateau, quasiment indépendante de la température comme reporté sur la figure 1.3. Il est observé dans un grand nombre de systèmes (citons par exemple Boser (1972), Podkyuko et Pustovalov (1978) et Ryen et al. (2006)). Malheureusement bien qu'il s'agisse d'un phénomène assez général opérant autour de la température ambiante, il reste encore mal compris. Il a fait l'objet de plusieurs hypothèses que nous résumons ici.
L'explication la plus répandue de ce phénomène décrit la contrainte critique d'écoulement comme la résultante d'un mélange d'obstacles thermiquement activables et athermiques. Les solutés situés dans le plan de glissement interagissant à courte portée forment des obstacles dont le franchissement est thermiquement activable selon le mécanisme décrit précédemment. En revanche, les obstacles interagissant à longue portée avec la dislocation par interaction élastique sont considérés comme non-thermiquement activables (Gremaud et Kustov 1999, Soare et Curtin 2008).

Ce champ élastique à longue portée peut être vu comme une contrainte interne (Friedel 1956; 1964). Wille et al. (1987) formulent la possibilité que les clusters de soluté peuvent également constituer des obstacles athermiques. Le problème d'une telle explication est qu'à notre connaissance personne n'en a encore fourni une explication formelle comme l'a souligné Haasen (1979).
La deuxième interprétation du plateau se situe dans le phénomène de vieillissement dynamique (Picu et al. 2005). Aux températures considérées, les solutés peuvent migrer et ainsi former des atmosphères de Cottrel ancrant la dislocation. La mobilité de ces dernières est ainsi réduite et la contrainte d'écoulement ne diminue plus avec la température. Un des problèmes soulevé par cette explication est que le régime athermique s'observe également pour des températures où la mobilité des dislocations est plus grande de plusieurs ordres de grandeur par rapport à la vitesse de diffusion des solutés. De plus, les phénomènes d'instabilité sur les courbes de traction liés à la ségrégation de soluté sur les dislocations n'ont pas toujours été observés pour le régime athermique. Ces instabilités sont en général la signature de l'effet de vieillissement dynamique.
Une troisième piste d'explication réside dans l'effet d'ordre chimique ou de diffusion à courte portée. Lors de la synthèse de l'alliage, le lent refroidissement des échantillons provoque un retour partiel à l'équilibre thermodynamique. Il se forme alors des atmosphères de soluté. Pour les métaux CFC, dont les dislocations dissociées sont séparées par une faute d'empilement, les solutés peuvent également ségréger sur la faute d'empilement. Ces phénomènes conduisent à l'ancrage des dislocations. Toutefois, il a été montré expérimentalement dans de nombreux systèmes que la contrainte d'écoulement reste identique après une première déformation plastique dans le premier stade de glissement primaire. Ces observations mettent en doute l'origine du régime athermique causé par un retour partiel à l'équilibre lors de la synthèse de l'alliage.
Récemment Gremaud (2004) a formulé l'hypothèse que la contrainte athermique devait s'exprimer non pas seulement en fonction des forces d'obstacles mais également en fonction des forces de frottement agissant sur la dislocation. Dans cette description, quand la température augmente, la distance de parcours moyenne des dislocations entre deux barrières thermiquement activables croît également. La friction exercée sur la dislocation joue donc un rôle plus important et ce d'autant plus qu'elle augmente avec la température. Les auteurs formulent alors la barrière énergétique à franchir par les dislocations comme la somme de la barrière constituée par les solutés et celle de l'énergie dissipée par les frottements. Leur formalisme conduit à une contrainte d'écoulement ne dépendant plus de la température à partir de la température du plateau.
Enfin Boser (1973a) a développé également une théorie du DSS basée sur un frottement interne. Son approche consiste à calculer théoriquement à l'aide de fonctions aléatoires la force de frottement résultante pour un long segment de dislocation dont la dimension a le même ordre de grandeur que la distance entre deux sources de dislocation. La force ainsi calculée ne dépend pas de la température et conduit à une barrière non thermiquement activable.

Régime des hautes températures $T = T_d \rightarrow T_f$

Le dernier régime des hautes températures apparaît typiquement autour de $T_d = T_f/2 \approx 700K$. Ce régime est particulier car la microstructure du matériau évolue à l'échelle du temps de l'essai de traction. Comme représenté sur la figure 1.3 deux scénarios sont possibles. Le premier, représenté en trait continu, consiste dans une poursuite de la décroissance de la limite d'élasticité comme dans le cas du régime thermiquement activé (Boser 1972, Gilman 1956). À ces températures la déformation plastique ne s'effectue plus seulement par glissement simple. La décroissance de la contrainte d'écoulement correspond à l'activation thermique d'autres mécanismes comme le glissement dévié et la montée des dislocations participant au franchissement des obstacles.
Le deuxième scénario, représenté sur la figure 1.3 par un trait discontinu, est une croissance de la contrainte de glissement dû au vieillissement dynamique (Traub et al. 1977, Neuhauser 1993). Il se caractérise par une grande dispersion de la contrainte d'écoulement dans cette gamme de températures ainsi qu'une déformation hétérogène de l'alliage. Pendant la déformation, les dislocations se meuvent moins rapidement que les solutés qui vont pouvoir former des atmosphères. Les dislocations traînent alors une atmosphère ancrante de soluté participant à l'accroissement de la limite d'élasticité. Ce dernier régime de croissance est suivi par une décroissance de la contrainte d'écoulement qui est due à l'activation des mécanismes précédemment évoqués.

1.1.2 Effet de la concentration

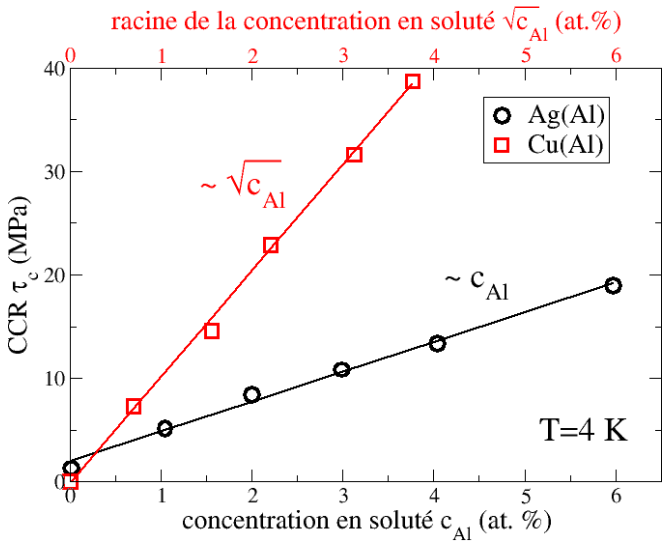


FIGURE 1.4 – *Variation de la contrainte d'écoulement expérimentale avec la concentration à une température de 4K pour des alliages mono-cristallins Cu(Al) et Ag(Al) d'après Hendrickson et Fine (1961) et Koppenaal et Fine (1962). Les droites correspondent à une régression des données expérimentales (symboles) suivant les lois de puissance indiquées sur le graphique.*

Dans les alliages CFC, la limite d'élasticité augmente avec la concentra-

tion en soluté. C'est le phénomène de DSS à proprement parler où c'est la mise en solution d'impuretés qui ancre les dislocations. Le durcissement des solutions solides de Cu(Al) et Ag(Al) observé à basse température par Hendrickson et Fine (1961) et Koppenaal et Fine (1962) est reporté sur le graphique 1.4. Ces expériences montrent l'accroissement de la contrainte d'écoulement τ_c avec la concentration en soluté c. Elles sont caractéristiques du DSS des matériaux CFC dont la limite d'élasticité suit une loi de la forme :

$$\tau_c = \tau_p + Ac^r, \tag{1.2}$$

avec τ_p la contrainte de Peierls du métal pur, A une constante dépendant de l'intensité de l'interaction entre dislocation et soluté et r un exposant dépendant de la statistique du durcissement. L'observation expérimentale des paramètres A et r nous intéresse donc au plus haut point car elle nous renseigne sur les mécanismes pilotant le DSS.
L'exposant r de la concentration a notamment fait l'objet de nombreux travaux car il permet a priori de pouvoir discriminer entre les différents modèles de DSS. La majorité des mesures expérimentales de contrainte d'écoulement est soit réalisée à la température du plateau donnant τ_μ soit à température nulle donnant τ_0. Nous entendons par la contrainte à température nulle, la contrainte d'écoulement extrapolée à une température nulle suivant le mécanisme d'activation thermique (cf. τ_0 sur la figure 1.3). L'essentiel des données expérimentales décrivant le DSS des métaux CFC disponibles dans la littérature concerne les alliages d'Al, Ag, Cu, Au et Ni.

Les statistiques des alliages d'Al à température nulle sont données par Podkyuko et Pustovalov (1978) (en ajustant l'équation 1.2 sur leurs données nous calculons $r = 0,84$) et Zander et al. (2007) ($r = 2/3$) pour les alliages de Al(Mg) et Al(Mn). Les mêmes mesures ont été réalisées sur des alliages commerciaux d'Al(Mg), Al(Mn) et Al(Cu) (Ryen et al. 2006, Draissia et Debili 2005) à la température du plateau et montrent un paramètre $r = 1$.
Des expériences similaires ont été effectuées sur les alliages de Cu(Zn), Cu(Al), Cu(Ge), et Cu(Mn) à température nulle par Hendrickson et Fine (1961), Feltham (1968), Lehmann (1969), Traub et al. (1977), Wille et al. (1987) et Neuhauser (1993), exhibant cette fois une puissance r égale à $1/2$. Wendt et Wagner (1982) observent $1/2 < r < 2/3$ dans le système Cu(Fe) à la température du plateau quand Cizek et al. (1974) estiment $r = 2/3$ dans les alliages de Cu(Mg), Cu(Si), Cu(Cd), Cu(Au) et Cu(Ag). Enfin, Garstone et Honeycombe (1957) mesurent $r = 1$ pour des échantillons de Cu(Ag) refroidis à l'azote liquide.
Le DSS dans les solutions solides d'Au a été étudié notamment par Kan et Haasen (1970), Jax et al. (1970). Ces auteurs mesurent une puissance r égale à $2/3$ dans Au(Al), Au(In), Au(Cd), Au(Ga) et Au(Zn) à la température du plateau.
D'autres alliages CFC ont fait l'objet d'investigations à température ambiante comme Ni(Pd), Ni(Ru), et Ni(Rh) (Phillips 1964) montrant une loi de durcissement en $r = 1/2$. Des essais de nano-indentation à température ambiante offrent une autre méthode de mesure donnant $r = 1$ pour l'alliage Ni(Al) (Zhao 2001, Cahn 2001).

En prenant connaissance des statistiques expérimentalement observées, nous constatons que l'exposant r de la concentration dans l'équation 1.2 n'est pas constant et soulève des difficultés dans la description du DSS des CFC. En effet, r varie en fonction de la matrice considérée. Ce paramètre varie même pour une matrice identique comme il a été montré expérimentalement par Mishima et al. (1986) dans une étude des alliages de Ni testés en compression à la température de l'azote liquide. Les travaux Mishima et al. (1986) ont porté sur un grand nombre d'alliages binaires dont les solutés appartiennent aux métaux de transition ainsi qu'aux éléments du sous-groupe B. En ajustant leurs mesures sur l'équation 1.2, nous calculons $0,5 < r < 1,3$. D'autre part, du fait de la solubilité limitée des éléments d'alliages, les données expérimentales peuvent parfois être ajustées de manière équivalente sur différentes lois de puissance avec $1/2 < r < 2/3$ (Nixon et Mitchell 1981, Suzuki et al. 1991). Pour pouvoir rendre compte du taux de durcissement observé expérimentalement dans les alliages de Ag(Au), Cu(Au) et Cu(Zn), Flinn (1958) a dû considérer les effets d'ordre à courte distance (Fisher 1954) ainsi que la ségrégation des solutés sur la faute d'empilement (Suzuki 1957). Enfin il a été observé que le paramètre r peut également évoluer en fonction de la température comme dans l'alliage de Ag(Al) étudié par Hendrickson et Fine (1961) passant de $r = 1$ pour $T = 4$K à $r = 0,5$ pour $T = 470$K.

Des expériences semblables ont été menées dans les systèmes HCP montrant les mêmes caractéristiques. A température nulle, Butt et al. (1980) et Akhtar et Teghtsoonian (1972) ont mesuré des coefficients r compris entre $r = 2/3$ et $r = 1$ pour les alliages de Cd(Zn), Cd(Ag), Mg(Zn) et Mg(Al), Mg(In), Mg(Zn) respectivement. Cette dépendance est confirmée pour les polycristaux de Mg(Y) (Gao et al. 2009) et Mg(Al) (Caceres et Rovera 2001) à la température du plateau.

Cette synthèse des résultats expérimentaux concernant l'exposant r montre que la question de la statistique du durcissement reste ouverte car cet exposant peut varier avec la matrice, le type de soluté, la gamme de concentration considérée et la température.

Nous notons finalement que des expériences de DSS ont également été menées dans des systèmes où les solutés occupent une position interstitielle comme la solution solide de Ni(C) (Nakada et Keh 1971). Les résultats présentent des caractéristiques similaires avec un plateau de contrainte à température ambiante et une dépendance linéaire τ_0 en fonction de la concentration. En revanche, les niveaux de contrainte mesurés pour des concentrations équivalentes sont supérieurs d'un ordre de grandeur aux solutions solides substitutionnelles comme prédit par Fleischer (1964).

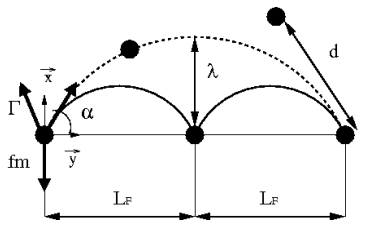


FIGURE 1.5 – *Théorie de Fleischer-Friedel.*

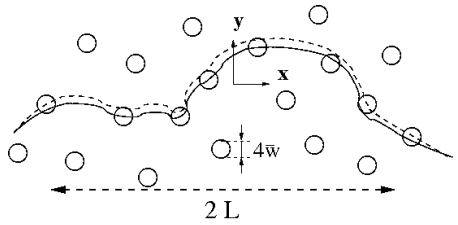


FIGURE 1.6 – *Théorie de Mott-Nabarro-Labusch.*

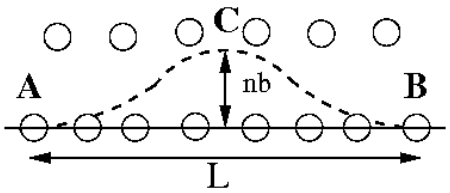


FIGURE 1.7 – *Théorie de Butt-Feltham.*

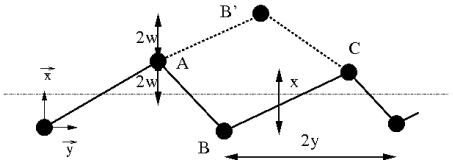


FIGURE 1.8 – *Théorie de Friedel-Mott-Suzuki.*

1.2 Modélisation théorique du durcissement par solution solide

1.2.1 Modèles analytiques de la limite d'élasticité statique

Dans la littérature, différentes théories statistiques ont été proposées pour calculer la CCR des solutions solides à une température nulle. Les mesures expérimentales les plus proches de cette contrainte correspondent à la contrainte extrapolée à une température nulle (cf. τ_0 sur la figure 1.3). C'est cette contrainte que nous pourrons simuler au niveau atomique par des simulations statiques et ainsi tester les modèles. Avant de les mettre en œuvre, nous nous proposons ici de les passer en revue.

L'hypothèse classique des modèles analytiques est que la CCR peut être calculée à partir de l'interaction unique entre un atome d'impureté isolé et une dislocation. Ces modèles ne prennent en compte que les obstacles situés dans le plan de glissement ancrant plus fortement les dislocations (Fleischer et Hibbard 1963). De prime abord, ils posent le problème dans le contexte d'une solution solide hors équilibre. Ce cadre leur permet de ne pas considérer les mécanismes d'ancrage dus à l'effet d'ordre à courte distance (Fisher 1954), à la formation d'atmosphères (Cottrell 1947) ou à la ségrégation de soluté sur la faute d'empilement (Suzuki 1957, Poirier 1976). La distribution des solutés est donc considérée comme parfaitement aléatoire. La probabilité de trouver un atome de soluté sur un site atomique est égale à la concentration atomique en soluté de la solution solide.

Deux familles de modèles existent : les modèles d'ancrage sur des obstacles isolés et les modèles à ancrage collectif (Brandt 1986). La démonstration générale des modèles de champs moyens présentés ici suit globalement une même démarche. Elle consiste à supposer une configuration critique d'ancrage comme reportée schématiquement sur les figures 1.5, 1.6,1.7 et 1.8. À cette configuration d'ancrage est associée une statistique d'interaction et une longueur caractéristique moyenne. La contrainte

critique est alors déduite en écrivant l'équilibre entre la force de Peach-Kohler exercée sur la dislocation et la force d'ancrage le long de la longueur caractéristique.

Théorie de Fleischer-Friedel

Un des modèles classiques estimant le DSS est le modèle de Fleischer-Friedel (FF) (Fleischer et Hibbard 1963). L'hypothèse principale de ce modèle est que la ligne de dislocation se courbe entre les obstacles isolés distribués de manière aléatoire (cf. figure 1.5). Pour calculer la longueur L_f sur laquelle la dislocation se courbe, nous utilisons l'hypothèse de Friedel (1964). Elle consiste à considérer que l'aire balayée par la dislocation après décrochage correspond en moyenne à l'aire contenant un obstacle. Cette aire est fournie par s/c où c est la concentration en obstacle et s la surface atomique des plans de glissement (111) des dislocations dans les métaux CFC. L'angle critique associé à la force maximale de l'impureté f_m est $\alpha = f_m/2\Gamma$ avec Γ la tension de ligne de la dislocation (cf. figure 1.5). la longueur, dite de Friedel, $L_f = \sqrt{2s\Gamma/cf_m}$ se déduit alors de l'égalité entre l'aire balayée par la dislocation et l'aire moyenne contenant un obstacle. La CCR est donnée par l'équilibre entre la force de Peach-Kohler et une chaîne moyenne régulière d'obstacles de force f_m : $\tau_c b L_f = f_m$ où b est le vecteur de Burgers. La formule de FF s'écrit alors

$$\tau_c = \frac{f_m^{3/2}\sqrt{c}}{b\sqrt{2s\Gamma}}. \tag{1.3}$$

Nous devons garder à l'esprit que le modèle de FF a été validé pour des obstacles forts comme les précipités et pour des obstacles de faible concentration atomique (Foreman et Makin 1966). Cela contraste avec le cas d'obstacles faibles et nombreux des solutions solides CFC substitutionnelles.

Théorie de Mott-Nabarro-Labusch

La théorie de Mott-Nabarro-Labusch (MNL) a été construite à partir de plusieurs contributions (Mott et Nabarro 1948, Mott 1952, Labusch 1970; 1972, Nabarro 1977; 1985). La première hypothèse est que l'interaction dislocation-soluté possède une distance d'interaction w. Nous introduisons le paramètre $v = 2w$ pour être conforme à la définition de Nabarro. Ici, nous ne spécifions pas le caractère de l'interaction entre dislocation et soluté à savoir attractif ou répulsif. Le modèle de MNL considère une dislocation comme une ligne élastique continue avec cette fois une configuration critique quasi-droite comme reportée sur la figure 1.6. Le long de la ligne de dislocation, le cœur de la dislocation interagit avec plusieurs obstacles en même temps. Dans un ruban de longueur $2L$ et de largeur $2v$ le nombre de sites atomiques dans les plans contigus au plan de glissement est $8vL/s$. L'interaction avec ce ruban se fait à la fois avec des obstacles attractifs et répulsifs. À l'intérieur du ruban, le nombre moyen d'obstacles est donné par $2n = 8vLc/s$. Le segment de dislocation est soumis à une force dépendant de sa rigidité. Mott (1952) a montré que cette force peut s'écrire comme $2Lf_m^2x/L'v^2\Gamma$ avec x la position de la dislocation et L' la distance moyenne entre obstacles situés le long du segment

$2L$. La distance L' est donc fixée par $4L'vc/s$. Mott et Nabarro (1948) ont fait l'hypothèse que la distance caractéristique peut être identifiée comme la distance au-dessus de laquelle la fonction de Green de la ligne élastique devient négligeable : $L = (L'v\Gamma\sqrt{2}f_m)^{2/3}$. En suivant les notations des travaux de Mott et Nabarro, le comptage des obstacles situés devant et derrière le segment $2L$ donne un nombre total d'interactions $2n$, lequel possède une force moyenne égale à $f_m/2$. La force maximale est donnée par une fluctuation moyenne de la concentration devant et derrière le segment $\sqrt{2n}f_m/2$. Pour obtenir le CCR, il faut maintenant équilibrer cette force avec la force externe de Peach-Kohler $2L\tau_c b$:

$$\tau_c = \left(\frac{c^2 v f_m^4}{b^3 s^2 \Gamma}\right)^{1/3}. \tag{1.4}$$

Ici, nous avons pris en compte les obstacles situés au-dessus et au-dessous du plan de glissement. En général, notons que la théorie MNL est souvent considérée comme fournissant une bonne description du DSS pour les solutions solides concentrées. Une tentative d'extension de ce modèle permettant de prendre en compte plusieurs types d'obstacles, comme par exemple des paires de solutés comportant différentes forces d'obstacles et différentes portées, a également été proposée par Proville et al. (2006). Ce modèle a donné satisfaction pour décrire le DSS d'un segment de dislocation coin dans un alliage de Ni(Al) simulé. Dans la suite de ce mémoire, nous testerons donc les hypothèses de ce modèle pour un autre alliage et pour différents types de dislocations.

Théorie de Butt-Feltham

Dans la théorie de Butt-Feltham (BF) (Butt et Feltham 1980, Butt et al. 1981, Butt et Feltham 1993), un segment de dislocation non dissocié se libère d'une configuration ancrée par la nucléation d'un bombement local (cf. figure 1.7). La forme critique de cette déflexion peut être approchée par un triangle ACB de hauteur $W = nb$, laquelle correspond au point de col énergétique requis pour décrocher la dislocation entièrement. Selon Feltham W suit l'étalement des cœurs de dislocation et pour les métaux CFC il donne l'estimation $W \approx 3b$. Comme les modèles précédents, la théorie BF suppose de décrire uniquement les obstacles situés dans le plan de glissement. D'après Butt et Feltham, le long de la ligne de dislocation, la distance inter-soluté est approximativement $b/\sqrt{c}$ (le long d'une ligne (une dimension) la distance moyenne est b/c). Pour obtenir la description la plus quantitative possible, nous distinguons cette distance moyenne en fonction des géométries différentes dépendant du caractère de la dislocation. En appliquant l'approche BF à la symétrie hexagonale, nous obtenons les distances $\lambda = \sqrt{2}b/\sqrt{c}$ pour une dislocation coin et de $\lambda = b/\sqrt{c}$ pour une dislocation vis. L'enthalpie nécessaire à la formation de la déflexion est $H = U/L\lambda + 2W^2\Gamma/L - \tau bWL/2$ où U est l'énergie de liaison soluté-dislocation et L l'extension de la déflexion le long de la ligne de dislocation. Dans cette expression, nous reconnaissons respectivement l'énergie de liaison avec les obstacles, le coût en énergie élastique pour former la déflexion et le travail effectué par la force de Peach-Kohler. Si nous suivons l'hypothèse d'une relation force-distance entre une dislocation et

un soluté linéaire par morceaux, l'énergie de liaison peut être déduite de la force et de la portée de l'obstacle. U s'écrit alors comme $U = f_m w$ (Caillard et Martin 2003). La courbure de la déflexion est déterminée par la contrainte appliquée. Pour un certain W, nous en déduisons l'extension $L = \sqrt{8W\Gamma/\tau b}$. À la configuration critique, l'enthalpie s'annule ce qui nous donne le résultat final :

$$\tau_c = \frac{4 f_m w}{bW\lambda}. \tag{1.5}$$

La dépendance en concentration de τ_c suit ici $\sqrt{c}$. Notons enfin que, comme mentionné par Butt et Feltham, le taux de durcissement peut varier avec une loi de puissance différente de $\sqrt{c}$ si la variation de la hauteur de déflexion W avec la concentration est prise en compte.

Théorie de Friedel-Mott-Suzuki

Une autre théorie proposée par Friedel, Mott et Suzuki (FMS) dans leurs ouvrages (Friedel 1963; 1964, Suzuki et al. 1991) considère les quelques atomes ancrant fortement une ligne de dislocation non dissociée. Cette théorie autorise la dislocation à prendre une courbure locale bien plus importante que dans les modèles précédents. Le premier effet de l'ancrage de la dislocation est de donner à cette dernière une forme en « zigzag » comme reportée sur la figure 1.8. L'interaction est caractérisée par une énergie de liaison U que nous approchons par $f_m w$ valide pour une relation force-distance linéarisée (Caillard et Martin 2003). Nous rappelons brièvement la dérivation de ce modèle. L'amplitude du zigzag dans le plan de glissement est noté W et la longueur d'onde de la ligne de dislocation est L. Selon Friedel (1964), le nombre de solutés contenus dans l'aire de glissement $WL/2$ est donné par l'inverse de la densité de surface c'est-à-dire $WL/2 = s/c$. Pourtant un calcul précautionneux nous donne $WL = s/c$. En effet, la construction d'un réseau régulier bidimensionnel où les obstacles sont séparés par L dans la direction de la ligne et par W dans la direction de glissement nous donne un nombre de soluté égal à $WL = s/c$. Notons que ce calcul est en accord avec la démonstration du modèle donnée par Suzuki et al. (1991). L'énergie de liaison par unité de longueur est $E_1 = 2 f_m w/L$. L'énergie due à la tension de ligne impliquée dans le zigzag est donnée par $E_2 = \Gamma(\sqrt{W^2 + L^2/4} - L/2)/(L/2) \approx 2\Gamma W^2/L^2$ au premier ordre en W/L. En minimisant la différence $E_2 - E_1$ nous obtenons la valeur du zigzag $W = (f_m w s/4\Gamma c)^{1/3}$ qui fixe la forme de la dislocation et donc $E_1 = 2 f_m w W c/s$ et $E_2 = 4\Gamma c^2 W^4/s^2$. L'application d'une contrainte extérieure déforme la dislocation. Ces auteurs font l'hypothèse que l'effet de la contrainte externe est de décrocher la ligne de dislocation depuis le fond du puits de potentiel où la tension de ligne exerce une force maximale dans la direction de glissement. En considérant que la configuration d'énergie maximale est rencontrée pour une dislocation droite ($W = 0$), à mi-chemin du prochain obstacle, la différence d'énergie entre ce maximum et la configuration en zigzag est $E_1/2 - (E2 - E1)$. Multipliée par L, cette quantité nous donne le travail nécessaire de la contrainte externe pour franchir la barrière de soluté. L'aire comprise entre ces deux configurations, zigzag et droite, est $WL/2$ de telle sorte que le travail de la

contrainte est $\tau_c bWL/2$, lequel doit être égal à $(E2 - E1/2)L$. Le résultat final est ici

$$\tau_c = \frac{f_m wc}{bs}. \tag{1.6}$$

Il est remarquable que cette expression ne dépende pas de la tension de ligne au contraire des modèles précédents. En outre, le modèle de FMS montre une dépendance linéaire de τ_c avec la concentration en accord avec certaines expériences.

1.2.2 Effet de taille et de module

La revue des modèles de DSS précédemment exposée montre que les lois de durcissement s'expriment systématiquement sous la même forme en fonction de la force maximale d'obstacle f_m et de la concentration c :

$$\tau_c = \tau_p + B f_m^{\delta} c^r, \tag{1.7}$$

avec B une constante pouvant selon les modèles s'exprimer en fonction de la tension de ligne et de la portée d'interaction soluté-dislocation. À partir des théories analytiques, la force maximale d'ancrage apparaît désormais explicitement dans l'expression de la CCR. Afin de comprendre l'intensité du DSS observée expérimentalement, d'abondants travaux ont été entrepris pour calculer f_m analytiquement.

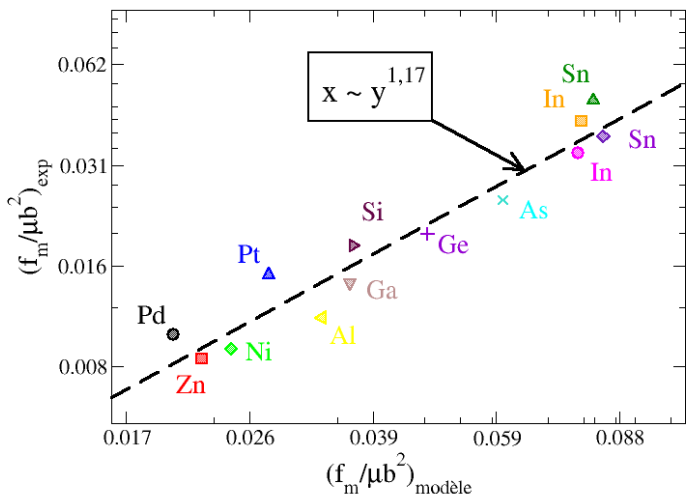


FIGURE 1.9 – *Valeurs maximales normalisées des forces d'ancrage dérivées des expériences de durcissement par solution solide pour différents alliages de Cu en fonction de leurs estimations théoriques d'après Argon (2007).*

L'ancrage des dislocations par les atomes de soluté revêt plusieurs origines parmi lesquelles les plus importantes sont les effets de taille et de module du soluté dans la matrice. L'effet de taille provient de la différence entre le paramètre de maille du soluté et celui de la matrice créant un champ de pression autour du soluté (Cottrell 1947). Ce champ élastique interagit avec le champ de pression des dislocations coin créant

une énergie d'interaction E_a. Bien qu'en théorie élastique linéaire isotrope le champ de pression d'une dislocation vis pure est toujours nul, les effets de cœur non-linéaires créent également pour cette dernière un champ de dilatation (Seeger et Bross 1956). Ce champ de pression des dislocations vis a été également pris en compte dans les travaux de la littérature décrivant l'interaction due à l'effet de taille entre dislocation et soluté. Le second effet, dit de module, provient quant à lui de la différence de module élastique entre soluté et matrice (Eshelby 1957). Si nous considérons une dislocation comme un champ de déformation, elle peut interagir avec une inclusion plus ou moins rigide formée ici par un atome de soluté. La déformation de l'inclusion par rapport à celle de la matrice crée une énergie d'interaction E_μ. D'autre part, le champ élastique d'une dislocation n'est pas homogène. L'énergie d'interaction dislocation-soluté est donc fonction de la position de la dislocation par rapport au soluté. Les auteurs ayant cherché à exprimer analytiquement la force maximale d'obstacle f_m ont considéré le champ d'une dislocation droite, lequel varie dans les directions perpendiculaires à la ligne de dislocation. Ces directions sont celle de glissement x et celle perpendiculaire au plan de glissement z. Un soluté situé à une hauteur z_0 par rapport au plan de glissement oppose alors une force au mouvement de la dislocation égale à la dérivée de l'énergie d'interaction dans la direction de glissement $f_m = \partial E(x, z_0)/\partial x$. En combinant les forces provenant de l'effet de taille $\partial E_a/\partial x$ et de l'effet de module $\partial E_\mu/\partial x$ Fleischer (1961) et Jax et al. (1970) démontrent la corrélation entre la force d'obstacle f_m calculée élastiquement et le taux de durcissement des métaux nobles $\partial \tau_c/\partial c$. Fleischer (1963) souligne notamment le rôle des dislocations vis au travers d'un effet de module plus important pour ces dernières.

La corrélation entre force calculée élastiquement et DSS n'est pourtant pas sans soulever certaines questions. En effet la combinaison des effets de taille et de module ainsi que celle du rôle des dislocations coin et vis sont problématiques. Dans les travaux décrits précédemment, cette combinaison s'exprime comme

$$f_m \sim |\partial E_a/\partial x \pm A \partial E_\mu/\partial x|, \tag{1.8}$$

avec A un multiplicateur ajusté afin d'obtenir la meilleure corrélation entre la force $\partial E/\partial x$ et $\partial \tau_c/\partial c$. Selon les auteurs utilisant l'équation 1.8, A reflète le poids joué par chaque type de segment de dislocation, coin et vis, dans le DSS. En se basant sur les modèles de DSS, Gypen et Deruyttere (1981) discutent la composition des effets de taille et de module suivant

$$f_m \sim \left[(\partial E_a/\partial x)^{1/\delta} + (\partial E_\mu/\partial x)^{1/\delta}\right]^\delta, \tag{1.9}$$

avec δ l'exposant de la force maximale d'interaction provenant de l'équation 1.7. Boser (1973b) ignore quant à lui l'effet de taille des dislocations coin. Il justifie son raisonnement en argumentant que la force produite par cet effet est une fonction impaire par rapport à la direction perpendiculaire au plan de glissement z. En effet selon la théorie élastique linéaire, les solutés situés au-dessus et au-dessous du plan de glissement attirent et repoussent les dislocations coin dans les mêmes proportions. Leurs

forces respectives exercées sur la dislocation se compensent provoquant selon cet auteur une résistance au glissement due à l'effet de taille des dislocations coin nulle.

De notre point de vue, la corrélation la plus pertinente réalisée entre la force f_m calculée élastiquement et celle déduite des expériences de DSS nous est fournie dans les récents travaux d'Argon (2007). Nous rappelons ici brièvement les étapes de son approche dont les résultats sont reportés sur la figure 1.9 pour différents alliages de cuivre. Dans sa démarche Argon (2007) réalise le calcul de la force maximale d'ancrage d'un atome de soluté en prenant en compte les deux sources de l'interaction (taille et module) pour les dislocations coin et vis. Il restreint son calcul à la limite de validité de la théorie élastique linéaire c'est-à-dire pour une distance dislocation-soluté supérieure à b. Pour cela, il calcule $(f_m)_{\text{modèle}}$ pour un soluté situé deux plans au-dessus du plan de glissement d'un métal CFC et en déduit la portée d'interaction $w = 1,7b$. Les valeurs expérimentales de τ_c sont extrapolées à une température nulle par une loi en $T^{2/3}$. Les résultats expérimentaux des alliages de Cu ont montré un accord satisfaisant avec une loi de type MNL présentée dans la section précédente (cf. équation 1.4 page 31). En inversant l'équation de MNL Argon peut alors estimer la force maximale expérimentale comme

$$(f_m)_{exp} = \left[\frac{d\sigma}{d\tau_c^{2/3}}/A\right]^{3/4}. \tag{1.10}$$

Enfin Argon utilise la moyenne arithmétique de $(f_m)_{\text{modèle}}$ des dislocations coin et vis pour obtenir son résultat final reporté sur la figure 1.9. Argon observe également une corrélation semblable pour les alliages d'Ag et Au. Notons ici qu'à l'inverse des travaux de Fleischer (1963) et Haasen (1979) aucun multiplicateur arbitraire n'a été utilisé.

Si la corrélation établie entre expériences et modèles théoriques par l'intermédiaire de la théorie élastique constitue un réel succès, elle laisse toutefois certaines questions en suspens. En effet les approches développées jusqu'ici ont négligé certaines interactions. Par exemple, l'effet de torsion d'une dissociation vis rencontrant un centre de dilation décrit par Doukhan et Saada (1972) n'est pas pris en compte. D'autre part, des effets de structure électronique dans l'ancrage des dislocations ont été mis en évidence dans les travaux de Mishima et al. (1986) et Shinoda et al. (1987). Selon Akhtar et Teghtsoonian (1972) la différence de valence entre matrice et soluté dans les alliages de Mg peut également expliquer une partie du DSS expérimentalement observé. Enfin, les approches de la littérature formulent des hypothèses qu'il est nécessaire de vérifier. Par exemple, elles décrivent l'interaction dislocation-soluté à l'aide de la théorie élastique linéaire ; pourtant les interactions les plus intenses ont lieu près du cœur des dislocations. Ces zones sont le siège de grandes déformations pour lesquelles la théorie élastique linéaire n'est plus valide. De plus, elles considèrent pour la plupart d'entre elles des dislocations non-dissociées ce qui n'est pas le cas des métaux CFC. D'autre part, le mélange des forces agissant sur les segments vis et coin et pilotant la CCR est arbitraire. Enfin, comme nous l'avons précédemment présenté,

les différentes statistiques de durcissement observées expérimentalement au travers de l'exposant r ne sont pas comprises. Il faut pourtant pouvoir disposer d'un modèle de DSS robuste pour pouvoir établir le lien entre interaction élémentaire dislocation-soluté et expérience.

Les problèmes soulevés ici montrent qu'il n'est pas encore possible de prédire le DSS quantitativement. Surtout nous ne pouvons pas comparer le DSS pour des alliages CFC de matrices différentes. Plusieurs des interactions soluté-dislocation décrites ne comportent pas de formulations analytiques et sont souvent négligées alors que certaines hypothèses des théories de champ moyen du DSS doivent être vérifiées. En vue d'une meilleure compréhension du DSS, nous avons entrepris d'examiner ces problèmes à l'aide de simulations atomistiques.

1.3 Simulation du durcissement par solution solide

Comme nous l'avons vu précédemment, il est nécessaire de traiter certains effets et de vérifier les hypothèses pouvant améliorer la description du DSS. La nécessité d'un outil numérique pour traiter ce problème physique est d'autant plus prégnante que la question du DSS fait intervenir des phénomènes à la fois aléatoires et non-linéaires rendant les traitements analytiques hors de portée. Aujourd'hui encore malgré les nombreux travaux entrepris, fournir la force critique nécessaire pour mouvoir une ligne élastique à travers un paysage d'énergie aléatoire à une température donnée demeure un problème non-résolu. Nous présentons ici les résultats et les approches numériques obtenus dans la littérature. Deux familles de simulations peuvent traiter le problème du DSS : les simulations de lignes élastiques continues et les simulations atomistiques. Chacune d'entre elles relève d'un compromis entre la taille du système à simuler, le coût de calcul et le niveau de détail nécessaire.

1.3.1 Modélisation de dislocation comme une ligne élastique

Il existe deux catégories de simulations pour traiter une dislocation isolée comme une ligne élastique continue. Elles sont fonction de la manière avec laquelle est décrite l'élasticité de la dislocation : les simulations dites de tension de ligne (TL) et les simulations de dynamique des dislocations discrètes (DDD).

Les simulations de TL considèrent la rigidité d'une dislocation comme une constante égale à la tension de ligne. Cette approximation locale de l'élasticité a permis de réaliser les premières simulations de DSS. Elles ont notamment été développées par Foreman et Makin (1966) et Kocks et al. (1975). Leurs simulations montrent un bon accord avec la théorie de FF présentée précédemment pour des obstacles forts. Labusch (1977) donne une interprétation théorique de la différence rencontrée entre la valeur théorique de champ moyen et la valeur numérique du milieu aléatoire simulé. À l'aide de cette méthode de TL, Nogaret et Rodney (2006) et Proville (2009) ont également étudié les effets de tailles finies en montrant que la contrainte critique d'écoulement d'une dislocation en

solution solide dépend de la taille du cristal. Elle diminue avec la longueur de la ligne de dislocation par un mécanisme de décrochage collectif tandis qu'elle augmente avec la longueur de parcours de la dislocation, la probabilité de rencontrer une configuration plus ancrante augmentant. Le coût relativement faible en temps de calcul de ces simulations de TL autorise à réaliser des simulations avec des effets de température (Xu et Picu 2007) et à étudier la sensibilité du mouvement des dislocations à la vitesse de déformation. Les simulations de référence du DSS traité par la méthode de TL ont été réalisées par Arsenault et al. (1989a;b), Arsenault et Li (1989). Ils traitent à la fois la contrainte critique statique τ_0 en fonction de la concentration mais également le cas plus complexe de la contrainte d'écoulement en fonction de la température $\tau_c(T)$. Les résultats des simulations statiques de Arsenault et al. (1989a) présentent une CCR variant comme la racine carrée de la concentration en accord avec la théorie de FF. Pour traiter du problème du DSS en température, ils procèdent par incrément de déformation en calculant les barrières d'énergie franchies localement par la dislocation. En appliquant la théorie de l'état de transition au paysage énergétique ainsi calculé, ils en déduisent la variation de τ_c avec la température. Leurs résultats exhibent une dépendance en $T^{2/3}$ de la CCR en accord avec les valeurs expérimentales d'alliage de Cu.

Toutefois, le modèle de tension de ligne est une approximation ne prenant pas en compte l'interaction d'une ligne de dislocation avec elle-même (Kirchner 1984). Les moyens de calcul modernes permettent de traiter explicitement cette interaction non locale par la méthode de DDD (Kubin et al. 1992, Devincre et Kubin 1997). En utilisant cette technique de simulation Hiratani et Bulatov (2004) étudient le DSS pour une population d'obstacles composée de deux types d'obstacles différents. La CCR déduite de leurs résultats numériques et théoriques fait apparaître une loi de mélange de type pythagorienne pour des obstacles faibles. Hiratani et al. (2003) ont également étudié la CCR en fonction de la température et de la vitesse de déformation d'une dislocation traversant une population de tétraèdres de faute d'empilement. Dans cette étude, les auteurs mettent en évidence une compétition entre activation thermique et frottement visqueux conduisant à l'observation d'un plateau de contrainte pour les vitesses de déformations élevées. Les simulations de DDD ont également été mises en œuvre par Bako et al. (2007) pour étudier le glissement d'une dislocation vis dans un matériau modélisant un acier renforcé par dispersion d'oxyde.
Enfin, en la couplant avec une simulation de Monte-Carlo cinétique, la méthode de DDD permet d'envisager une étude des processus thermiquement activés plus complexe comme le vieillissement dynamique. C'est ce qui a été réalisé par Deo et al. (2005) qui ont étudié dans le Mo la propagation de décrochements nucléés à partir d'atomes de soluté distribués dans le métal. Ils en déduisent la loi de vitesse d'une dislocation en fonction de la contrainte appliquée et de la concentration en soluté. Un autre exemple de ce couplage entre DDD et méthode stochastique nous est donné par Chen et al. (2008) qui étudient une jonction de dislocation dans un alliage CFC où les atomes de soluté peuvent diffuser. De manière surprenante, ils observent que la diffusion des solutés et leurs interactions

avec les dislocations peuvent à la fois durcir ou adoucir la force de la jonction.

En revanche, les simulations de ligne de dislocation comme la TL et la DDD impliquent de nombreuses approximations pour traiter de l'interaction entre obstacle et dislocation. Les méthodes de TL décrivent ainsi le plus souvent la force maximale d'un obstacle par un angle critique. Au-delà de cet angle, la dislocation ancrée se libère. Dans le cas du DSS cette description peut être erronée du fait de la faiblesse des obstacles et de la nature discrète de l'interaction à l'échelle atomique, rendant impossible la définition d'un tel angle critique. Enfin la contrainte d'écoulement critique dépend fortement du potentiel d'interaction dislocation-soluté. Or, comme les modèles analytiques, cette interaction est fréquemment décrite par la théorie élastique linéaire dans les simulations de lignes élastiques. L'interaction entre le cœur des dislocations et les atomes de soluté peut également faire l'objet d'un paramétrage ajusté pour reproduire les données expérimentales à postériori. Pour pouvoir surmonter ces difficultés provenant de la nature discrète et non-linéaire de l'interaction et paramétrer physiquement les simulations de lignes élastiques, il est nécessaire de réaliser des simulations au niveau atomique.

1.3.2 Simulations atomistiques

Parfois l'étude des obstacles rencontrés par les dislocations nécessite un traitement explicitement atomique. Une méthode largement utilisée dans ce cas est la méthode de dynamique moléculaire (DM) utilisant des potentiels inter-atomiques. Ces potentiels sont ajustés pour reproduire certaines des propriétés physiques du matériau simulé et permettent de traiter un nombre d'atomes conséquent.

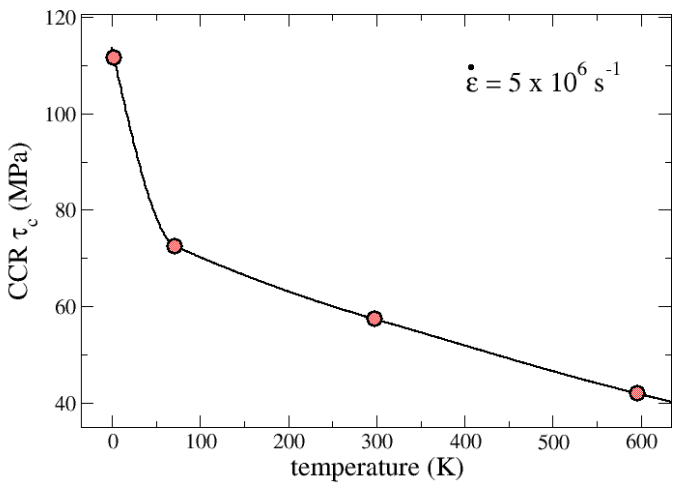


FIGURE 1.10 – *Contrainte critique de franchissment d'une paire d'atomes de Cu par une dislocation coin de longueur* $3,51$ *nm en fonction de la température dans une matrice de Fe d'après Tapasa et al. (2006).*

Par exemple, la DM a été utilisée dans l'étude de l'interaction entre le cœur de deux dislocations dans le Cu par Zhou et al. (1998). L'information tirée de ces simulations peut ainsi nous renseigner sur la structure de cœur prise par les dislocations comme dans l'interaction dislocation avec des auto-interstitiels (Doyama et al. 2007). Elle permettent également de mesurer directement les forces d'obstacle s'opposant au mouvement des dislocations comme celles des défauts causés par les dégâts d'irradiation (Rodney et Martin 2000, Bacon et Osetsky 2007). Dans le contexte du DSS, les simulations de DM nous permettent de décomposer les forces d'obstacle de différentes origines. Terentyev et al. (2008) mesurent ainsi dans un alliage de Fe(Cr) les parts de la contrainte d'écoulement dues aux précipités et au DSS. L'interaction dislocation coin-soluté dans le Fe a également été étudié par Tapasa et al. (2005) pour des atomes de Cu substitutionnels et Tapasa et al. (2007) pour des atomes de C interstitiels. Ils mesurent la contrainte critique lors du franchissement d'un soluté dans des simulations réalisées à une vitesse de déformation imposée. Sur la figure 1.10, nous reportons un exemple étudié par Tapasa et al. (2006) de décroissance de la contrainte d'écoulement avec la température lors du franchissement d'une paire de Cu par une dislocation coin dans le Fe. Leurs résultats montrent un important abaissement de la force critique d'obstacle avec la température comme attendu des phénomènes thermiquement activés.

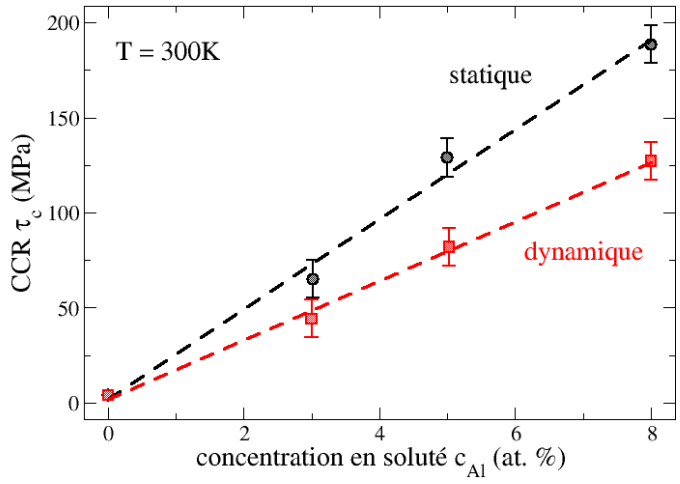


FIGURE 1.11 – *Contrainte critique de glissement statique et dynamique d'une dislocation coin en fonction de la concentration en soluté dans un alliage de Ni(Al) d'après Rodary et al. (2004).*

Le DSS étant un phénomène d'ancrage collectif, la contrainte critique de glissement d'une dislocation coin a également été étudiée en fonction de la concentration et de la température. Pour mesurer la contrainte critique de glissement d'une dislocation dans une solution solide par la méthode de DM plusieurs stratégies sont possibles. Elles se divisent en deux catégories qui sont les simulations statiques et dynamiques et se

focalisent soit sur l'effet de la température soit sur l'effet de la concentration en soluté. Par exemple dans un alliage d 'Al-5%Mg, Olmsted et al. (2006) ont calculé le paysage énergétique rencontré par une dislocation en solution solide afin de déduire la variation de la limite d'élasticité avec la température. Ils utilisent une dislocation suffisamment courte pour être considérée comme droite c'est-à-dire de l'ordre de la longueur caractéristique de MNL décrite précédemment. Le paysage d'énergie interne est alors calculé comme la somme de toutes les contributions provenant des atomes de soluté isolés. Ils comparent les temps d'attentes obtenus par DM pour plusieurs configurations d'ancrage avec celui déduit du paysage énergétique. Leur description théorique leur permet de dériver la CCR en fonction de la température montrant un accord satisfaisant avec l'expérience. Rodary et al. (2004) ont étudié le DSS en fonction de la concentration en soluté dans des solutions solides de Ni(Al) par une méthode dynamique. Leurs principaux résultats sont reportés sur les figures 1.11 et 1.12. Ils simulent le glissement d'une dislocation soumise à une contrainte constante pour plusieurs concentrations en soluté à une température égale à 300K. La contrainte d'écoulement correspond à la contrainte minimale pour laquelle la dislocation glisse sur une distance arbitraire. Cette contrainte d'écoulement, dite contrainte statique, est reportée sur la figure 1.11 en fonction de la concentration montrant une dépendance linéaire avec cette dernière. Suivant la même démarche, une dépendance linaire de la contrainte critique a également été mesurée dans une solution solide de Fe(Cu) par Tapasa et al. (2006). Une méthode différente consiste à calculer statiquement cette contrainte par des simulations de relaxation correspondant à la contrainte d'écoulement à température nulle. Suivant cette méthode Proville et al. (2006) reproduisent une dépendance linéaire avec la concentration de la contrainte critique dans l'alliage de Ni(Al). Par une approche théorique, ils expliquent cette dépendance linéaire par la présence d'obstacles plus durs constitués de paires d'atomes de soluté.

Entre deux configurations ancrées, la dislocation glisse dans la solution solide et il est intéressant de connaître les paramètres décrivant sa dynamique. Différentes études par DM ont été menées pour décrire cette dynamique dans les alliages de Ni(Al) (Rodary et al. 2004), Al(Mg) (Olmsted et al. 2005), Ni(Au) (Marian et Caro 2006) et Fe(Cu) (Tapasa et al. 2006). Ces différentes études font ressortir des tendances similaires. Des résultats caractéristiques de ce type de simulation sont reportés sur la figure 1.12 dans le cas particulier de l'alliage de Ni(Al) où la vitesse de la dislocation est tracée en fonction de la contrainte pour plusieurs concentrations. La vitesse moyenne de la dislocation augmente avec la contrainte appliquée jusqu'à une vitesse de saturation. Pour de faibles contraintes la relation contrainte-vitesse est linéaire et suit une loi de type :

$$v = \frac{b(\tau_{app} - \tau_d)}{B}, \tag{1.11}$$

avec v la vitesse moyenne de la dislocation, τ_{app} la contrainte appliquée, τ_d la contrainte dynamique et B le coefficient de frottement visqueux. La contrainte τ_d, reportée sur la figure 1.11, correspond à l'extrapolation linéaire pour une vitesse moyenne nulle de la dislocation en solution so-

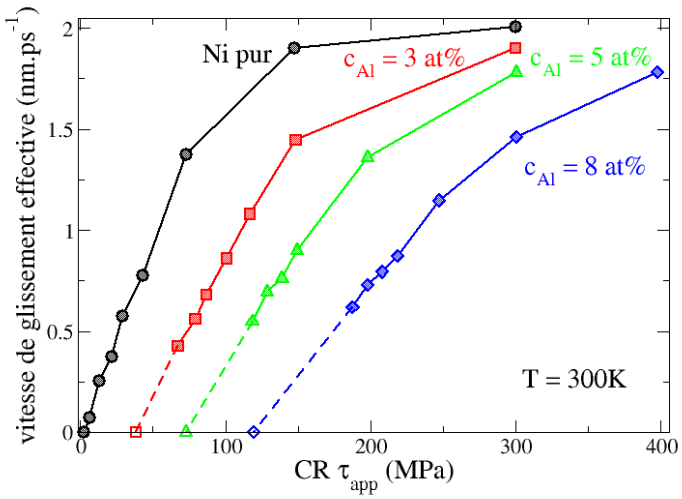


FIGURE 1.12 – *Vitesse moyenne de glissement d'une dislocation coin en fonction de la contrainte résolue appliquée dans un alliage de Ni(Al) pour plusieurs concentrations en soluté d'après Rodary et al. (2004).*

lide. Plus la concentration en soluté est importante moins les dislocations glissent rapidement dans la solution solide du fait d'un frottement accru des obstacles le long de la ligne de dislocation. L'accroissement de ce frottement se traduit par l'accroissement du coefficient B. Il est intéressant de noter que dans tous les travaux reportés ici, B varie linéairement avec la concentration. De plus, il varie linéairement avec la température comme attendu pour un processus d'interaction dislocation-phonon. Enfin Olmsted et al. (2005) et Marian et Caro (2006) se sont également intéressés aux régimes de vitesses situés autour des vitesses interdites. Ils montrent notamment que les régimes transsoniques sont plus difficilement atteignables pour les dislocations en solution solide.

Les simulations de DM peuvent également permettre d'obtenir des informations sur le vieillissement des solutions solides. Zhang et Picu (2004) et Xu et Picu (2006) ont ainsi étudié l'énergie de liaison entre une atmosphère de soluté et une dislocation dans les alliages d'Al(Mg). Les simulations atomistiques permettent également de proposer des nouveaux mécanismes de diffusion tels que les sauts de soluté au travers des cœurs de dislocation dans l'Al(Mg) pouvant expliquer le vieillissement dynamique de ces alliages (Curtin et al. 2006). Picu et Zhang (2004) mettent en évidence un chemin de diffusion privilégié le long de la ligne de dislocation. Ce mécanisme, connu sous le nom anglais de « pipe diffusion », a également fait l'objet de travaux pour le cas d'un atome de C situé dans le cœur des dislocations dans le Fe (Tapasa et al. 2007).

Les simulations utilisant des potentiels empiriques ne sont pas les seules simulations mises en œuvre au niveau atomique pour traiter des dislocations. Les méthodes de calcul de structure électronique sont également employées. La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité ou DFT

(pour *Density Functional Theory*) constitue actuellement l'une des méthodes les plus utilisées dans les calculs quantiques de la structure électronique de la matière (atomes, molécules, solides) aussi bien en physique de la matière condensée qu'en chimie quantique. Elle offre une description plus robuste mais néanmoins plus coûteuse en temps de calcul. Dans l'étude du DSS, la DFT doit donc être restreinte à certaines configurations particulières, le glissement d'une dislocation dans une solution solide étant pour l'instant inenvisageable. Elle sert par exemple à fournir des informations quantitatives au niveau atomique comme les effets de taille et de module d'un soluté dans une matrice dont l'importance pour le DSS a été rappelée précédemment. Les effets de taille et de module ont été calculés par DFT dans l'intermétallique NiAl par Fua et al. (2004) et dans l'alliage d'Al(Mg) par Zander et al. (2007). La DFT peut également calculer des propriétés fondamentales pour les dislocations comme la surface γ servant à déduire le potentiel de Peierls. Medvedeva et al. (2007) étudient par exemple la variation de ce potentiel par la présence d'impuretés pour différents alliages du groupe-V et du groupe-VI. Enfin les simulations mettant en jeu explicitement dislocation et soluté sont pour l'instant restées cantonnées aux matériaux cubiques centrés. Trinkle et Woodward (2005) étudient ainsi, dans leurs travaux sur le Mo, l'énergie de liaison entre une dislocation vis et un soluté pour en déduire l'énergie de nucléation d'un décrochement de dislocation.

Les simulations atomistiques apportent donc certaines réponses à des problèmes qui ne peuvent être traitées expérimentalement ou analytiquement. Elles comportent néanmoins des approximations comme dans le cas de la DM. Surtout elles possèdent des limites en temps et en espace. Traiter directement le problème de l'activation thermique du DSS, c'est-à-dire d'événements rares à grande échelle par simulation de DM semble hors de portée. Il faut donc combiner les approches en fonction du problème traité. En définitive, il est également nécessaire d'approfondir les liens qui existent entre expériences, théories et approches numériques.

Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté le contexte et introduit la problématique générale de la thèse. Le bilan des travaux présentés montrent que le DSS est bien caractérisé, même si la description des différents régimes de température fait l'objet de plusieurs interprétations. Nous comprenons pourquoi expérimentalement la contrainte d'écoulement diminue avec la température mais augmente avec la vitesse de déformation et la concentration. Si l'origine du DSS est modélisée par l'intermédiaire des effets de taille et de module, nous avons montré que sa prédiction quantitative pose problème. Bien que la phénoménologie du DSS dans les CFC a été reproduit avec succès par les simulations numériques, il existe une incertitude quand au modèle adéquat pour décrire le DSS. La statistique du durcissement n'est notamment pas comprise et nous ne pouvons pas comparer des alliages de matrices différentes.

Nous concluons ce chapitre en soulignant le fait qu'il est nécessaire

de mettre en œuvre des simulations atomistiques permettant de traiter explicitement la non-linéarité dans l'interaction du cœur des dislocations avec les solutés. Pour pouvoir tester les modèles de DSS, cette interaction doit être étudiée pour plusieurs alliages de matrices différentes.

Dislocations dans les métaux cubiques à faces centrées

2

Sommaire

2.1 Méthode de simulation 45
2.2 Géométrie des dislocations simulées 47
2.2.1 Cristallographie des dislocations 47
2.2.2 Structure de cœur des dislocations 48
2.2.3 Distance de dissociation des dislocations 59
2.3 Forces de réseau : la contrainte de Peierls 62
2.4 Tension de ligne des dislocations 64
Conclusion 69

À la vue des problématiques soulevées dans l'étude des travaux scientifiques précédents concernant le DSS des métaux CFC, nous orientons nos investigations dans deux directions principales : calculer les paramètres physiques décrivant le DSS et comparer des alliages CFC de matrice différente. Il est donc nécessaire dans un premier temps de caractériser les dislocations des métaux CFC pour plusieurs caractères de dislocations et pour des matrices différentes. C'est l'objet de ce chapitre.

Pour cela nous mettons en œuvre des simulations de statique moléculaire qui nous permettent de calculer les propriétés élémentaires des dislocations dans les matrices de Ni et d'Al pures. Nous présentons la cristallographie et la structure des cœurs de dislocation coin et vis. Enfin nous mesurons la contrainte de Peierls, la distance de dissociation et la tension de ligne des dislocations coin et vis pour les matrices de Ni et d'Al.

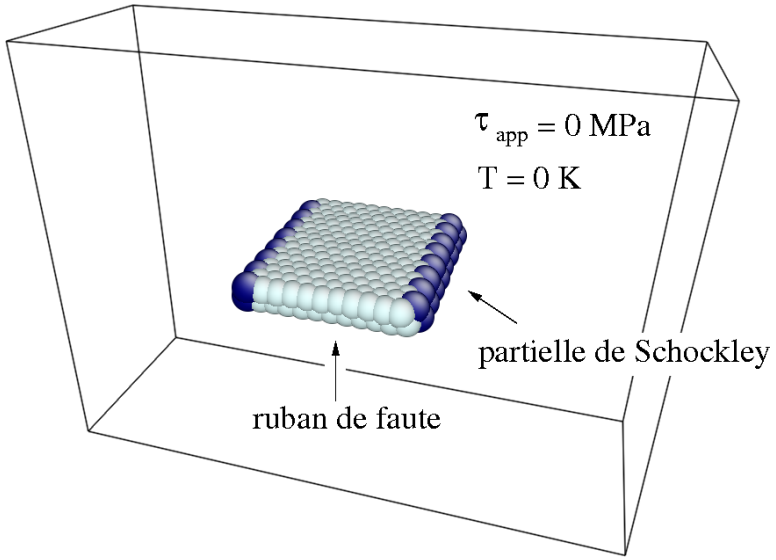


FIGURE 2.1 – *Image caractéristique des simulations de relaxation statiques décrites dans ce chapitre. Les simulations sont réalisées à une contrainte imposée nulle. Les atomes représentés appartiennent aux dislocations partielles (bleu foncé) ainsi qu'à la faute d'empilement (bleu clair) d'une dislocation dissociée d'un métal pur cubique à faces centrées.*

2.1 Méthode de simulation

Dans le but de pouvoir simuler le glissement d'une dislocation dans une solution solide, nous devons être capables de simuler un grand nombre d'atomes, de l'ordre de 10^6. Pour ce faire, nous mettons en œuvre des simulations atomistiques qui utilisent des potentiels interatomiques dont la dérivée nous donne accès aux forces exercées sur chaque atome. Cette méthode nous permet de traiter explicitement le cœur des dislocations en offrant un coût de calcul raisonnable. Nous simulons deux métaux CFC, le Ni et l'Al, dont les potentiels ont été développés respectivement par Angelo et al. (1995), Baskes et al. (1997) et Ercolessi et Adams (1994). La forme fonctionnelle de ces potentiels est de type Méthode de l'Atome Immergé (Daw et Baskes 1984) (cf. section A.1 page 177). Ce type de potentiel, plus connu sous le nom anglais de EAM (pour Embedded Atom Method), reproduit de manière satisfaisante les propriétés des métaux de transition CFC (Daw et al. 1993).

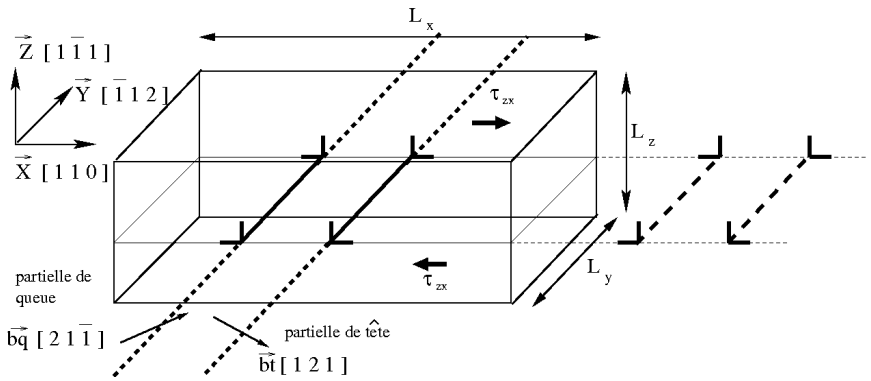


Figure 2.2 – *Boîte de simulation schématique contenant une dislocation coin dissociée. Les directions cristallographiques ainsi que les vecteurs de Burgers des dislocations partielles sont spécifiées. Des conditions aux limites périodiques sont appliquées dans les directions x et y correspondant respectivement aux directions de glissement et de ligne de la dislocation. Dans la direction perpendiculaire au plan de glissement z des conditions de bords libres sont imposées. Sur les surfaces supérieures et inférieures du cristal il est possible d'appliquer une contrainte τ_{xz} pour faire mouvoir la dislocation coin.*

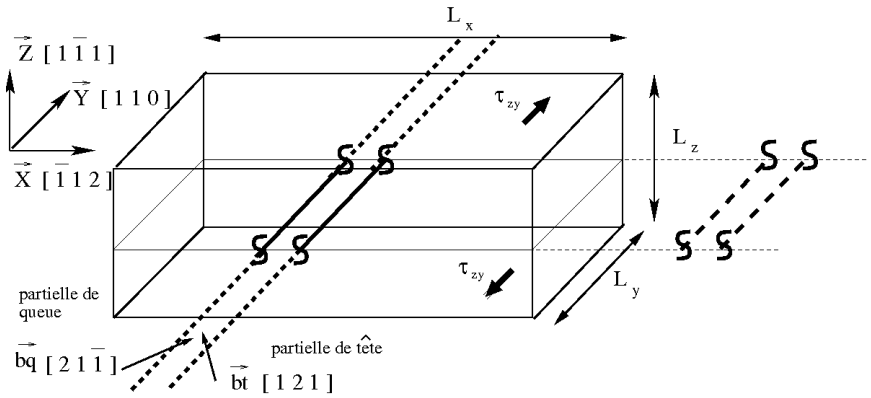


Figure 2.3 – *Idem que la figure 2.2 mais pour une dislocation vis.*

Le système de dislocation étudié dans ce mémoire de thèse suit la méthode de simulation développée par Rodney et Martin (2000). Nous

simulons un système composé d'une dislocation isolée dans une lame mince comme schématisé sur la figure 2.2 pour une dislocation coin et sur la figure 2.3 pour une dislocation vis. Afin de minimiser les effets de taille finie du système, des conditions périodiques sont imposées dans la direction de la ligne $\vec{Y}$ de dislocation ainsi que la direction de glissement $\vec{X}$ de la dislocation. Dans la direction perpendiculaire au plan de glissement $\vec{Z}$ des conditions de surfaces libres sont appliquées. Les atomes appartenant aux surfaces supérieures et inférieures du cristal sont contraints à une dynamique à deux dimensions en leur imposant une coordonnée z constante.

Dans le contexte de durcissement, le choix de cette géométrie de simulation est guidé par la possibilité de calculer les forces d'obstacles s'opposant au mouvement des dislocations de manière univoque. Les conditions aux limites périodiques permettent d'obtenir une invariance par translation du système dans la direction de glissement. D'autre part, le fait de simuler une dislocation unique évite les interactions entre dislocations comme dans le cas d'un système tri-périodique lequel implique la présence d'au moins deux dislocations. Dans notre système il n'y a donc pas de forces de configuration dues à des surfaces libres ou à des interactions élastiques entre dislocations. Par conséquent le calcul de l'interaction entre une dislocation et un obstacle ne dépend pas de la position de la dislocation dans la boîte de simulation.

En revanche, il faut garder à l'esprit que ces conditions aux limites impliquent une interaction de la dislocation avec ses images périodiques ainsi que celles créées par la présence des surfaces libres. Ces dislocations images reviennent à simuler effectivement un empilement infini de dislocations séparées par une distance L_x dans une lame mince d'épaisseur L_z, comme reporté sur les figures 2.2 et 2.3. Le résultat des calculs sont donc sujets à certains effets de taille finie présentés en annexe (cf. B page 181). Nous choisissons une taille de boîte de simulation avec laquelle nous travaillons tout au long de notre étude. La taille de notre système est choisie de sorte que la géométrie des cœurs de dislocations ne change qualitativement pas par rapport à des tailles de systèmes supérieures. Nous utilisons pour simuler les dislocations coin $L_x = 40b$ et $L_x = 70b$ pour les dislocations vis. Pour les deux caractères de dislocation, la distance entre les surfaces libres est égale à $L_z = 16b$. La longueur dans la direction de la ligne de dislocation L_y varie quant à elle de $7b$ à $520b$ en fonction du type de simulation réalisé.

Une difficulté de cette méthode réside dans l'introduction des dislocations dans le cristal. Comme l'a détaillé Rodney (2006), les conditions périodiques dans la direction de glissement $\vec{x}$ doivent faire l'objet d'un traitement spécifique en fonction du type de dislocation simulé. En effet dans le cas d'une dislocation coin, il est possible de considérer le défaut constitué par la dislocation comme équivalent à l'insertion d'un demi-plan cristallin de normale $\vec{X}$ et perpendiculaire au plan de glissement. Le nombre de plans cristallins n'est pas le même de part et d'autre du plan de glissement. Dans un cristal sans dislocation la différence de longueur entre la partie supérieure et inférieure du cristal est alors égale à un

vecteur de réseau c'est-à-dire un vecteur de Burgers b. Pour respecter la périodicité du cristal dans la direction $\vec{X}$, nous choisissons par conséquent la dimension du système L_x comme la moyenne des dimensions du cristal CFC au-dessus et au-dessous du plan de glissement.
Afin d'introduire une dislocation vis entre les deux plans $(1\bar{1}1)$ centraux, le champ de déplacement donné par la solution élastique d'une dislocation vis dissociée est appliqué aux atomes de la boîte de simulation. La formation de la dislocation vis implique alors un cisaillement relatif des plans supérieurs et inférieurs au plan de glissement égal à un vecteur de Burgers b dans la direction $\vec{Y}$. Pour compenser le décalage d'un glissement égal à un b au passage de la frontière suivant la direction $\vec{X}$, nous ajoutons $b/2$ à la condition périodique correspondante dans la direction $\vec{Y}$. De cette manière la périodicité du cristal est restaurée au passage de la frontière suivant la direction $\vec{X}$.

Les conditions aux limites de bord libre dans la direction $\vec{Z}$ nous permettent d'appliquer une contrainte sur les surfaces supérieures et inférieures du cristal. Cette contrainte est créée par l'ajout d'une force supplémentaire sur chaque atome des surfaces libres. Pour que la contrainte soit résolue, c'est-à-dire projetée dans le plan de glissement, la direction des forces appliquées aux atomes est parallèle aux surfaces libres. Par l'intermédiaire de la force de Peach-Kohler, cette contrainte nous permet d'exercer une force par unité de longueur sur les dislocations et de faire interagir ces dernières avec des obstacles. Les contraintes résolues parallèles aux vecteurs de Burgers pouvant mouvoir les dislocations coin (τ_{xz}) et vis (τ_{yz}) sont reportées respectivement sur les figures 2.2 et 2.3.

Afin de relaxer l'énergie potentielle du système nous utilisons une forme de l'algorithme de trempe rapide développée par Bitzek et al. (2006). L'algorithme fait converger le système vers son état d'énergie potentielle minimum nous donnant accès aux configurations stables des dislocations. Des simulations statiques sont également réalisées sous contrainte avec le même algorithme ce qui conduit cette fois à minimiser l'enthalpie du système. Ces simulations nous permettent d'étudier l'interaction entre une dislocation et un obstacle et de calculer la contrainte à partir de laquelle il n'y a plus de position stable pour la dislocation. Nous réalisons ainsi un calcul de la contrainte critique statique de franchissement de l'obstacle.

2.2 Géométrie des dislocations simulées

2.2.1 Cristallographie des dislocations

En raison de la nature périodique du cristal, le vecteur de Burgers des dislocations qui s'y trouvent ne saurait être quelconque. Il doit être tel que le déplacement qui en résulte rétablisse la périodicité du réseau. Les vecteurs de Burgers b sont donc des multiples du réseau. De plus Foreman (1955) montre que l'énergie d'une dislocation est proportionnelle à b^2. Le module de b est donc le plus souvent égal à la plus petite distance possible c'est-à-dire à la distance entre atomes premiers voisins du cristal.

Dans les métaux CFC, cette distance vaut $b = a/\sqrt{2}$ avec a le paramètre de maille de la matrice.

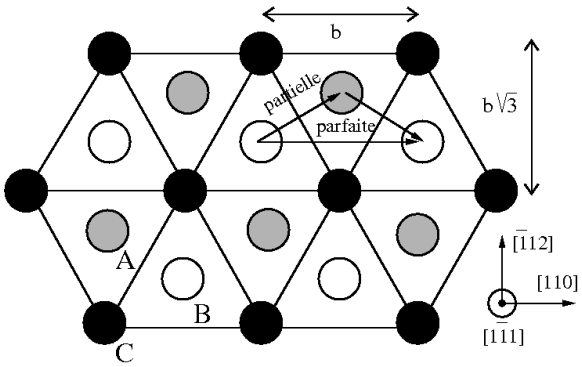


FIGURE 2.4 – *Portion d'un empilement de trois plans A (●), B (●) et C (○) $(1\bar{1}1)$ d'un métal CFC. Les plans B et C bornent un plan de glissement de dislocation. Les vecteurs correspondent aux glissements relatifs des plans B par rapport au plan C dus aux dislocations parfaites ou partielles.*

Les dislocations qui ont de tels vecteurs de Burgers sont appelées dislocations parfaites. Il peut exister des dislocations imparfaites qui introduisent des fautes d'empilement. C'est le cas des dislocations des métaux CFC dont la symétrie cristalline résulte de la séquence répétée d'un empilement compact d'atomes appartenant aux plans $\{111\}$. La figure 2.4 représente l'empilement élémentaire de trois plans $(1\bar{1}1)$ d'un cristal CFC dénoté par A, B et C. Le passage d'une dislocation parfaite glissant entre les plans B et C déplace les plans B et C relativement d'un vecteur de Burgers $[110]$ et rétablit la périodicité du réseau. Cependant, dans les métaux CFC, les dislocations sont dissociées en deux dislocations partielles de Shockley suivant la réaction de dissociation (Hirth et Lothe 1982, François et al. 1995) :

$$\frac{1}{2}[110] = \frac{1}{6}[21\bar{1}] + \text{Faute d'Empilement} + \frac{1}{6}[121] \tag{2.1}$$

Cette réaction de dissociation est schématisée sur la figure 2.4. Lors du passage d'une dislocation partielle, les atomes du plan B sont amenés au-dessous des atomes du plan A créant un empilement de type HCP. Cette partie de phase HCP située entre les deux dislocations partielles de Shockley dans les deux plans contigus au plan de glissement est nommée faute d'empilement du fait du changement dans la séquence d'empilement des plans $(1\bar{1}1)$.

2.2.2 Structure de cœur des dislocations

Description dans le plan perpendiculaire à la ligne de dislocation

Afin d'appréhender la structure des cœurs de dislocation, nous réalisons des cartes de déplacements différentiels. Ces cartes ont été proposées pour la première fois par Vitek (1974). Elles permettent une visualisation qualitative du champ de déformation d'une dislocation et apportent des informations sur les structures de cœur comme par exemple dans le cas

complexe de l'intermétallique NiAl (R. Schrolla 1998).

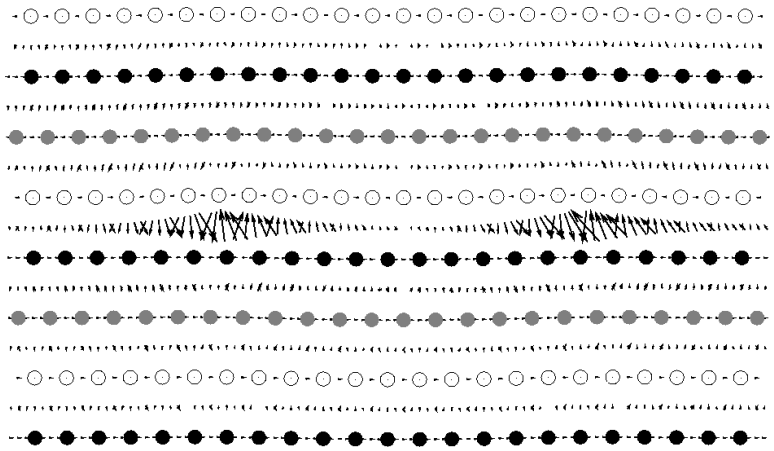


FIGURE 2.5 – *Structure de cœur d'une dislocation coin dans le nickel représentée par la méthode de carte de déplacements différentiels d'après Vitek (1974). Les symboles représentent les atomes dont le niveau de gris correspond à leurs positions dans la direction sortant de la page ($[\bar{1}12]$ pour une dislocation coin). Les flèches relient les atomes deux-à-deux et leurs modules sont proportionnels à la différence des déplacements par rapport à un cristal CFC parfait dans la direction du vecteur de Burgers.*

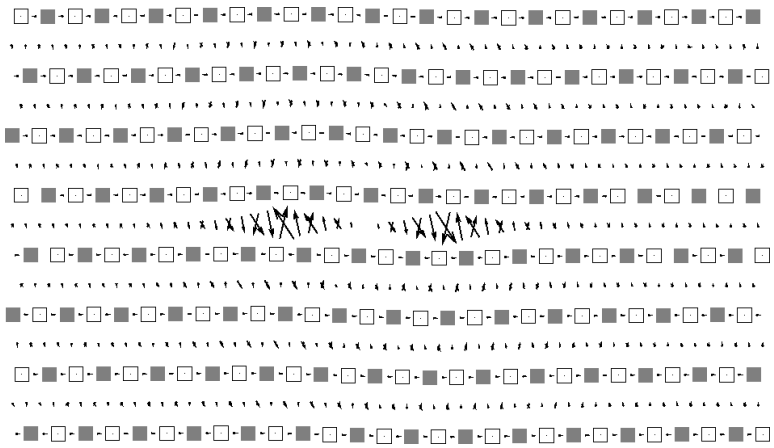


FIGURE 2.6 – *Structure de cœur d'une dislocation vis dans le nickel représentée par la méthode de carte de déplacements différentiels d'après Vitek (1974).*

Les cartes de déplacements différentiels des dislocations sont reportées sur les figures 2.5, 2.6, 2.7 et 2.8 pour les dislocations coin et vis dans les matrices pures de Ni et Al. Pour réaliser ces cartes, nous utilisons les positions des atomes obtenues après la relaxation des forces d'un système contenant une dislocation droite sans contrainte appliquée. Puis nous calculons le champ de déplacement par rapport au cristal CFC dû à la présence de la dislocation. Nous sélectionnons une tranche de matière perpendiculairement à la ligne de dislocation (direction $\vec{Y}$ des figures 2.2 et 2.3) pouvant contenir jusqu'à trois plans atomiques. Les niveaux de gris des atomes représentés sur les cartes de déplacements correspondent à leurs coordonnées suivant la ligne de dislocation (direction $\vec{Y}$ débouchant de la page). Nous nous intéressons à la différence des déplacements entre deux atomes suivant la direction [110] du vecteur de Burgers. Le module

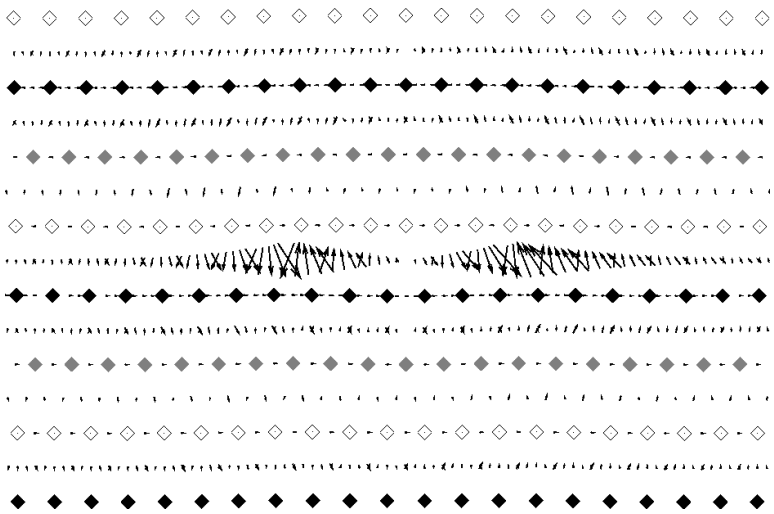


FIGURE 2.7 – *Structure de cœur d'une dislocation coin dans l'aluminium représentée par la méthode de carte de déplacements différentiels d'après Vitek (1974).*

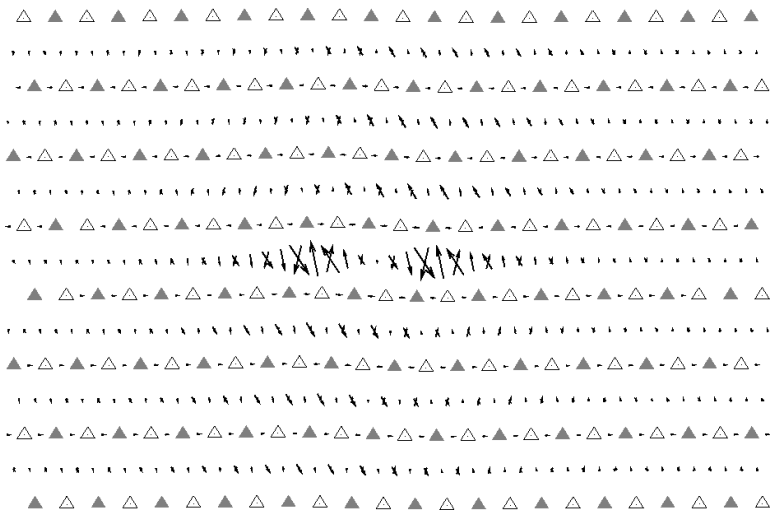


FIGURE 2.8 – *Structure de cœur d'une dislocation vis dans l'aluminium représentée par la méthode de carte de déplacements différentiels d'après Vitek (1974).*

des flèches reliant les atomes deux à deux est proportionnel à ce déplacement. Une grande flèche signifie donc une déformation importante de la liaison des deux atomes considérés. À partir de ces cartes, il est clair que les cœurs de dislocation s'étalent dans le plan de glissement $[1\bar{1}1]$. De plus nous observons la présence de deux centres de déformations intenses correspondant aux cœurs des dislocations partielles issus de la réaction de dissociation. Les dislocations vis semblent à la fois moins dissociées et moins étalées dans le plan de glissement. Nous notons que le sens des flèches est quant à lui arbitraire. Dans les cartes de déplacements 2.5, 2.6, 2.7 et 2.8 il est défini modulo $b/2$. Cette définition nous permet de localiser le centre des cœurs des dislocations partielles à l'endroit du changement de sens des flèches : $b/4$ pour la partielle de tête et $3b/4$ pour la partielle de queue. Nous retrouvons ici des résultats classiques pour les dislocations des métaux CFC déjà observés par exemple par Wen et al. (2005) dans le Ni utilisant le même potentiel interatomique. À l'exception de conditions spécifiques de contraintes et de températures, nous relevons que les dislocations vis des matrices de Ni et Al ne peuvent pas changer de plan de glissement du fait de la dissociation. Les dislocations de ces métaux possèdent un plan de glissement primaire clairement défini.

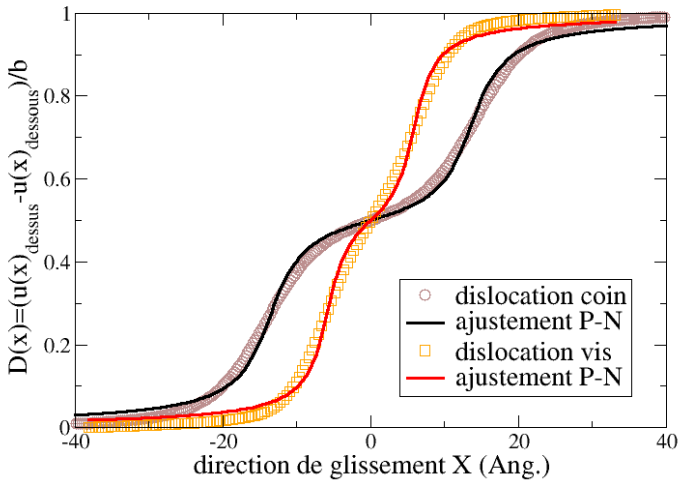


FIGURE 2.9 – *Géométrie des cœurs de dislocation dans le plan de glissement : déplacement relatif $D(x)$ des plans cristallins contigus au plan de glissement dans la direction du vecteur de Burgers en fonction de la position dans la direction de glissement x pour les dislocations coin (◯) et vis (□) dans le nickel. Les symboles correspondent aux simulations et les courbes aux ajustements sur le modèle de Peierls-Nabarro.*

Après avoir constaté que la déformation se situe essentiellement dans les plans de glissement, nous pouvons passer à une étude plus quantitative de la géométrie des cœurs de dislocation. Cette analyse est réalisée en calculant les déplacements par rapport au cristal parfait dans la direction du vecteur de Burgers des plans contigus supérieur u_{dessus} et inférieur u_{dessous} au plan de glissement. Le long de la direction de glissement $\vec{X}$, u_{dessus} et u_{dessous} sont calculés continument en interpolant les valeurs atomiques discrètes par une méthode de spline cubique. Nous calculons

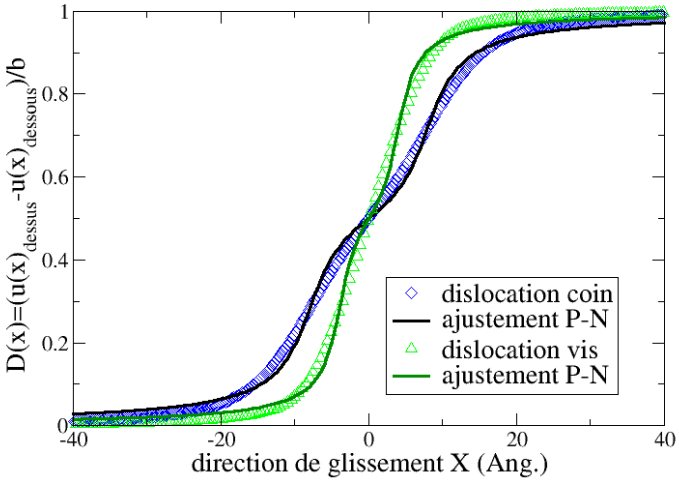


FIGURE 2.10 – *Idem que la figure 2.9 pour une dislocation coin (◇) et vis (△) dans l'aluminium. Les symboles correspondent aux simulations et les courbes aux ajustements sur le modèle de Peierls-Nabarro.*

alors leur différence $D(x) = u_{\text{dessus}} - u_{\text{dessous}}$ laquelle est reportée sur les figures 2.9 et 2.10 pour les dislocations dans Ni et Al respectivement. Lors du passage à travers le cœur de la dislocation, $D(x)$ varie de 0 à b le cristal étant cisaillé d'un vecteur de Burgers. Ces figures montrent des profils caractéristiques des dislocations des métaux CFC déjà observés par des simulations de DM dans le Cu, l'Al (Hakkinen et al. 1990) et le Ni (Wen et al. 2005).

Une méthode pratique pour paramétrer le champ de déplacement d'une dislocation étalée dans le plan de glissement est d'ajuster ce déplacement sur le champ développé par Peierls (1940) et Nabarro (1947) (P-N). Pour dériver leurs modèles, Peierls et Nabarro ont considéré l'équilibre entre l'énergie élastique $E_{el}(u(x))$ d'un cristal contenant une dislocation et l'énergie non-linéaire contenue dans le plan de glissement $E_{msf}(u(x))$ provenant du cisaillement de ce dernier (en anglais *misfit energy*) en fonction du champ de déplacement $u(x)$. En faisant l'hypothèse d'une énergie de cisaillement sinusoïdale dans le plan de glissement $\gamma(u(x))$, ils peuvent calculer $E_{msf}(u(x)) = \int \gamma(u(x))dx$. $E_{el}(u(x))$ est calculé à l'aide de la théorie élastique. L'énergie totale $E_{tot}(u(x)) = E_{el}(u(x)) + E_{msf}(u(x))$ est alors minimisée par rapport à $u(x)$ pour obtenir l'équation du déplacement dans le plan de glissement :

$$u(x) = \frac{b}{\pi}\arctan(\frac{x}{\eta}) + \frac{b}{2}, \tag{2.2}$$

où η représente le demi-étalement du cœur de la dislocation. Pour décrire le champ de déplacement des dislocations dans les métaux CFC le modèle de dislocation de P-N a été largement utilisé car, même s'il n'est pas quantitatif, il a le mérite de fournir une description analytique non-linéaire du cœur des dislocations. Par exemple Zhao et al. (2008) montrent qu'il est le modèle le plus approprié dans la description du cœur des dislocations

dans l'Au observé expérimentalement par une méthode de microscopie électronique en transmission à haute résolution. Cette description des dislocations est également utilisée par P. Szelestey et Kaski (2003) pour interpréter les résultats de leurs simulations atomistiques dans le Ni.
Dans le cas d'une dislocation dissociée en deux dislocations partielles, le champ de déplacement d'une dislocation de P-N dans la direction du vecteur de Burgers s'écrit

$$D(x) = \frac{b}{2\pi}\left[\arctan(\frac{x-d/2}{\eta}) + arctan(\frac{x+d/2}{\eta})\right] + \frac{b}{2}, \qquad (2.3)$$

avec d la distance de dissociation entre les dislocations partielles et η le demi-étalement des cœurs de dislocations partielles. Après ajustement de l'équation 2.3 sur les données de la figure 2.9, nous obtenons les distances de dissociation dans le Ni des dislocations coin $d_c^{Ni} = 10,9$ b et vis $d_v^{Ni} = 4,7$ b. Les distances de dissociation calculées pour une matrice d'Al sont $d_c^{Al} = 5,6$ b et $d_v^{Al} = 2,8$ b respectivement pour une dislocation de type coin et vis. Les dislocations vis sont moins dissociées que les dislocations coin en accord avec la théorie élastique (Hirth et Lothe 1982). Pour un même caractère de dislocation, elles sont également plus dissociées dans le Ni que dans l'Al. Nous traiterons cet aspect de la dissociation plus en détail dans une section ultérieure. Dans le Ni, la comparaison de nos résultats avec ceux obtenus par Wen et al. (2005) utilisant le même potentiel interatomique, mais des conditions aux limites différentes, montre un accord satisfaisant. Dans la matrice d'Al, Woodward et al. (2008) ont récemment réalisé des calculs de DFT pour étudier la structure des cœurs de dislocation. Ils trouvent une distance de dissociation légèrement inférieure pour une dislocation de type coin.

La deuxième quantité intéressante pour décrire la géométrie des dislocations est l'étalement des cœurs des dislocations partielles dans le plan de glissement. C'est dans ces zones de fortes déformations que l'interaction entre obstacle et dislocation est la plus intense. Les ajustements des données du Ni du graphique 2.9 sur l'équation 2.3 nous fournissent les étalements des dislocations partielles pour une dislocation coin $\eta_c^{Ni} = 1,36$ b et vis $\eta_v^{Ni} = 0,86$ b. À partir de la figure 2.10, nous obtenons pour une matrice d'Al $\eta_c^{Al} = 1,2$ b et $\eta_v^{Al} = 0,66$ b respectivement pour une dislocation coin et vis. L'étalement des cœurs des dislocations partielles suit par conséquent les mêmes tendances que la distance de dissociation. Il est plus important pour les dislocations de caractère coin. Pour un même caractère de dislocation, il est plus grand dans la matrice de Ni que dans la matrice d'Al. L'étalement plus important des dislocations coin est prédit dans le traitement originel du modèle de P-N. Le ratio de la taille des cœurs entre dislocations de type coin et vis est donné par $\eta_v/\eta_c = 1 - \nu$ avec ν le coefficient de Poisson en accord qualitatif avec nos résultats de simulation.

Description dans le plan de glissement

L'interprétation de la différence des étalements de cœur entre les deux matrices métalliques de Ni et Al est plus complexe. Elle requiert

la connaissance du coût énergétique de la formation d'une dislocation dans le plan de glissement c'est-à-dire de $E_{msf}(u(x))$. Or, contrairement à l'hypothèse du modèle de P-N uni-dimensionel, nous savons que les dislocations des métaux CFC se dissocient en dislocations partielles. Les dislocations coin ont ainsi des parties vis et inversement. Dans notre système une fonction simplement sinusoïdale $\gamma(u(x))$ n'est plus valide.

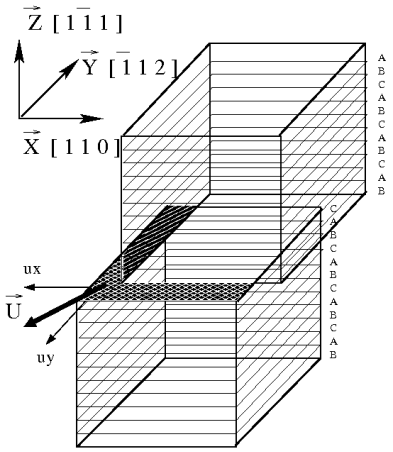


FIGURE 2.11 – *Méthode de calcul de la surface γ. Le cristal est cisaillé dans le plan $(1\bar{1}1)$ d'un vecteur $\vec{U}$. La relaxation s'opère uniquement dans la direction $\vec{Z}$.*

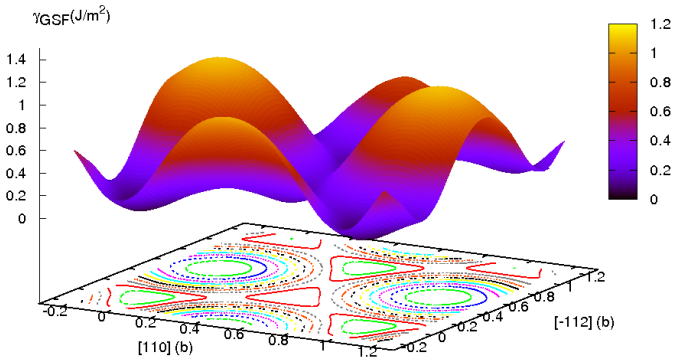


FIGURE 2.12 – *Surface γ du nickel obtenue à partir du potentiel EAM utilisé dans ce mémoire.*

Une méthode conventionnelle pour estimer numériquement l'énergie de cisaillement est de calculer l'énergie par unité de surface d'une translation rigide du cristal dans le plan de glissement (Zimmerman et al. 2000). Cette énergie dépend de la translation dans les deux directions parallèles au plan de glissement u_x, u_y. Du fait de la périodicité du cristal dans le plan de glissement, elle forme une surface périodique d'énergie appelée surface γ généralisée. Cette surface correspond à la généralisation en deux dimensions du potentiel sinusoïdal supposé dans l'approche de P-N. La figure 2.11 représente la méthode de calcul de la surface γ pour laquelle

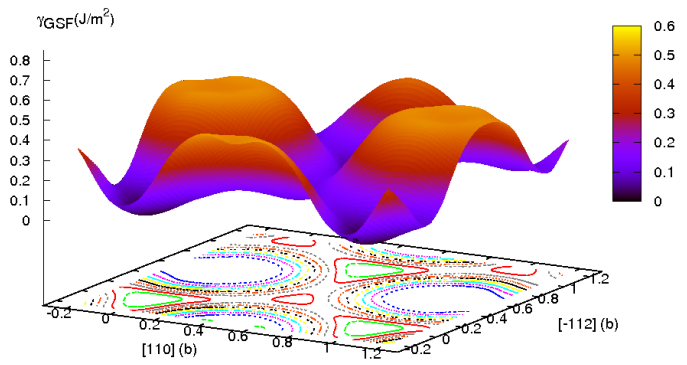


FIGURE 2.13 – *Surface γ de l'aluminium obtenue à partir du potentiel EAM utilisé dans ce mémoire.*

nous déplaçons rigidement deux blocs du cristal CFC d'un vecteur $\vec{U}$ parallèlement au plan de glissement $(1\bar{1}1)$. Les conditions périodiques sont appliquées dans les directions $\vec{X}$ et $\vec{Y}$ et seules les relaxations dans la direction perpendiculaire au plan de glissement sont autorisées à l'exception des atomes des deux surfaces libres. Les résultats du calcul des surfaces γ pour les matrices de Ni et Al sont reportés sur les figures 2.12 et 2.13.

Les surfaces γ nous donnent accès au coût énergétique de la formation de la dislocation et nous permettent également de comprendre l'origine dissociée de la structure des cœurs dans les matrices CFC. En effet les surfaces γ montrent un minimum intermédiaire dans le cisaillement d'un cristal par un vecteur de Burgers. Ce minimum correspond au déplacement d'un vecteur de Burgers d'une dislocation partielle de Shockley $\frac{1}{6}[21\bar{1}]$. L'énergie correspondante par unité de surface est l'énergie de faute d'empilement intrinsèque γ_0. Avec les potentiels EAM que nous utilisons nous obtenons les énergies de faute $\gamma_0^{Ni} = 89mJ.m^{-2}$ et $\gamma_0^{Al} = 109mJ.m^{-2}$ pour le Ni et l'Al respectivement. Notons que cette énergie peut être également calculée avec des conditions aux limites tri-périodiques (Heino et al. 1999) pour lesquelles nous obtenons la même valeur dans le Ni et $\gamma_0^{Al} = 104mJ.m^{-2}$ dans l'Al. La légère différence de résultats dans le cas de l'Al provient d'un effet des surfaces. Les estimations expérimentales de l'énergie de faute d'empilement montrent qu'avec le type de potentiel EAM que nous utilisons nous sous-estimons légèrement cette énergie. Carter et Holmes (1977) mesurent ainsi dans le Ni une énergie $\gamma_0^{Ni} = 120 - 130mJ.m^{-2}$ quand Westmacott et Peck (1971) et Rautioaho (1982) mesurent $\gamma_0^{Al} = 120 - 144mJ.m^{-2}$ dans l'Al.

Il est intéressant de comparer la réaction de dissociation décrite par des dislocations partielles de Shockley et la réaction de dissociation effectivement calculée dans les simulations atomistiques. Cette comparaison est réalisée sur les graphiques 2.14 et 2.15 en traçant le déplacement dans la direction $[\bar{1}12]$ (perpendiculaire au vecteur de Burgers de la dislocation

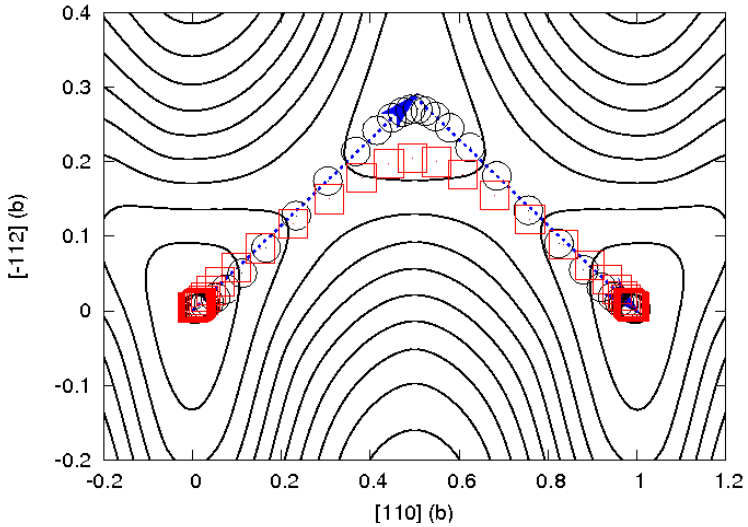


FIGURE 2.14 – *Déplacement à travers le plan de glissement dans la direction* [$\bar{1}$12] *en fonction du déplacement à travers le plan de glissement dans la direction* [110]. *Ce diagramme représente les chemins de dissociation des dislocations coin (◯) et vis (□) obtenus par simulations atomistiques dans le nickel. Les flèches correspondent aux dislocations partielles de Shockley parfaites. Les lignes de niveau sont obtenues à partir de la figure 2.12.*

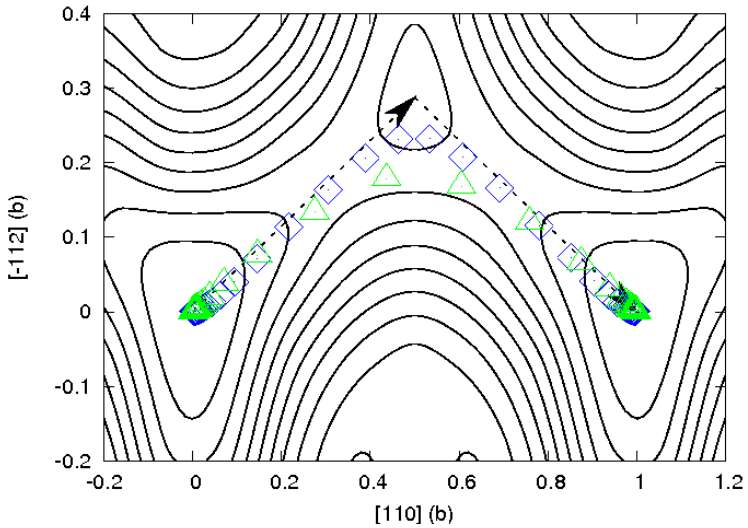


FIGURE 2.15 – *Déplacement à travers le plan de glissement dans la direction* [$\bar{1}$12] *en fonction du déplacement à travers le plan de glissement dans la direction* [110]. *Ce diagramme représente les chemins de dissociation des dislocations coin (◇) et vis (△) obtenus par simulations atomistiques dans l'aluminium. Les flèches correspondent aux dislocations partielles parfaites de Shockley. Les lignes de niveau correspondent à la figure 2.13.*

parfaite) en fonction du déplacement dans la direction [110] (parallèlement au vecteur de Burgers de la dislocation parfaite). Le déplacement dans la direction[$\bar{1}$12] est obtenu à partir de la simulation atomique relaxée de la même manière que le déplacement dans la direction [110] reporté sur les figures 2.9 et 2.10 mais en calculant cette fois u_y au lieu de u_x. Nous observons bien une dissociation des dislocations en deux dislocations partielles. Toutefois, les dislocations partielles simulées se différencient d'une dislocation partielle de Shockley. Cette déviation peut être mesurée par le module de la dislocation partielle dans la direction [$\bar{1}$12]. Nous nommons ce module $b_\perp$ comme module du vecteur de Burgers dans la direction perpendiculaire à la direction [110]. Toutes les dislocations simulées nous donnent un module $b_\perp$ effectif inférieur au module d'une dislocation partielle de Shockley égal à $b_\perp = b/\sqrt{12}$. Nous calculons dans le Ni $b_\perp^c = 0,94b/\sqrt{12}$ pour la dislocation coin et $b_\perp^v = 0,71b/\sqrt{12}$ pour la dislocation vis. Dans la matrice d'Al la dissociation des dislocations dévie notablement de celle des partielles de Shockley et nous obtenons $b_\perp^c = 0,81b/\sqrt{12}$ et $b_\perp^v = 0,63b/\sqrt{12}$. Les réactions de dissociations suivent par conséquent les mêmes tendances que celles observées pour la distance d et l'étalement η c'est-à-dire $b_\perp$ est moins grand pour les dislocations vis et, pour un même type de dislocation, moins grand dans la matrice d'Al. Le module $b_\perp$ est important car il nous renseigne sur le caractère de la dislocation partielle. Par exemple, les dislocations partielles d'une dislocation vis comportent des parties coin de module $b_\perp$ lesquelles génèrent selon la théorie élastique des champs de pression pouvant interagir à longue portée avec des atomes de soluté.

Finalement, nous constatons que la géométrie des dislocations dans les métaux CFC relève d'un compromis entre énergie de cisaillement du plan de glissement et énergie élastique des dislocations. Des auteurs comme Schoech (2001a;b), Schoeck et Krystian (2005) ont enrichi le modèle de P-N en le généralisant en deux dimensions. Leurs méthodes sont synthétisées dans Bulatov et Cai (2006). Elles améliorent la description des dislocations pour ce type de symétrie cristalline où les dislocations sont étalées dans le plan de glissement d'autant plus qu'il est désormais possible de calculer les surfaces γ par des méthodes de structure électronique. En revanche, il n'existe plus de solution analytique et la résolution du modèle de P-N en deux dimensions nécessite un traitement numérique.

2.2.3 Distance de dissociation des dislocations

Comme nous l'avons vu, les dislocations des métaux CFC se dissocient en deux dislocations partielles pour minimiser leurs énergies. Dans les chapitres suivants nous nous penchons sur l'interaction d'une dislocation avec des atomes de soluté, lesquels peuvent pincer ou étirer la dislocation dissociée. Le couplage entre les dislocations partielles est donc un paramètre important pour décrire l'interaction dislocation-obstacle. En modélisant les dislocations partielles comme des dislocations de Volterra (1907) séparées par une faute d'empilement, nous pouvons estimer la distance de dissociation d. Dans ce modèle simplifié la distance de dissociation résulte de l'équilibre entre la répulsion élastique $F_{int} = K/d$ des deux

dislocations partielles avec K dépendant du caractère de la dislocation et le coût énergétique de formation de la faute d'empilement γ_0. Hirth et Lothe (1982) donnent ainsi la distance d en fonction du caractère de la dislocation dissociée :

$$\begin{aligned} d &= \frac{\mu}{2\pi\gamma_0}\frac{b_c^2-(1-\nu)b_v^2}{(1-\nu)}, \qquad \text{dislocation coin} \\ d &= \frac{\mu}{2\pi\gamma_0}\frac{(1-\nu)b_v^2-b_c^2}{(1-\nu)}, \qquad \text{dislocation vis} \end{aligned} \tag{2.4}$$

avec μ le module de cisaillement, b_c et b_v les parties coin et vis du vecteur de Burgers des dislocations partielles b_p. Les signes aux numérateurs des équations 2.4 proviennent de l'attraction et de la répulsion des parties coin et vis des dislocations partielles. Dans le cas d'une dislocation coin (vis) dissociée, les parties coin (vis) $b_c = b/2$ des partielles se repoussent et les parties vis (coin) $b_v = b_\perp$ des partielles de signes opposés s'attirent. En utilisant les équations 2.4, nous obtenons pour la distance de dissociation seulement un accord qualitatif. Les résultats sont légèrement améliorés en utilisant le module effectif $b_\perp$ à la place de celui d'une partielle de Shockley idéale $b/\sqrt{12}$. Pour pouvoir obtenir une description plus quantitative de la dissociation, il est nécessaire de prendre en compte à la fois la non-linéarité de l'interaction entre partielle (Henager et Hoagland 2005) mais également de traiter explicitement la dissociation sur la surface γ en deux dimensions (Schoeck 2006).

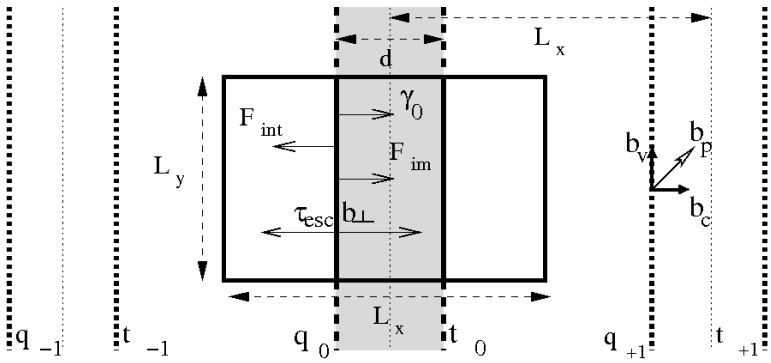


FIGURE 2.16 – *Schéma des forces agissantes sur une dislocation partielle (traits continus) de queue de vecteur de Burgers b_p droite et infinie. Les dislocations partielles sont dissociées d'une distance d et se repoussent d'une force F_{int}. La zone grisée représente le ruban de faute d'empilement produisant une force γ_0. Les traits discontinus correspondent aux dislocations partielles images dues aux conditions périodiques produisant une force F_{im}. $\tau_{esc}b_\perp$ est la force par unité de longueur produite par l'application d'une contrainte d'Escaig.*

Ce modèle simplifié nous permet en revanche de pouvoir prendre en compte analytiquement l'effet des conditions périodiques sur la rigidité de la liaison entre les dislocations partielles. Le schéma 2.16 représente les forces exercées sur une dislocation partielle dans le cas particulier d'une dislocation partielle de queue notée Q_0. Les dislocations images dans la direction de glissement sont nommées Q_i et T_i pour la ième image de la dislocation partielle de queue et de tête respectivement. L'effet des dislocations images dans la direction de glissement est reporté à travers la somme

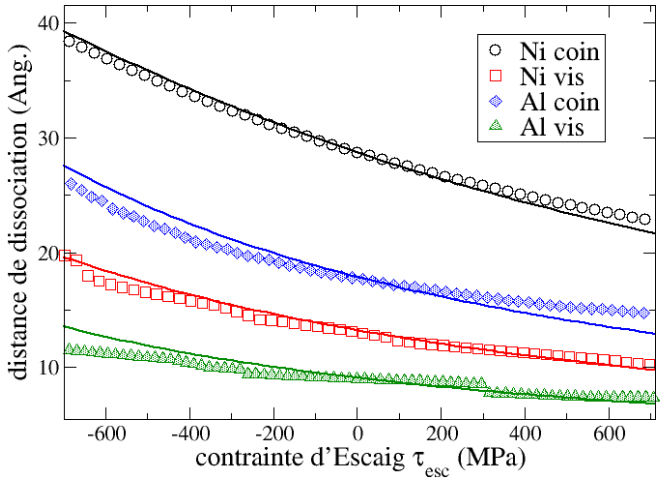


FIGURE 2.17 – *Distance de dissociation des dislocations partielles en fonction de la contrainte d'Escaig imposée, τ_{esc}. Les symboles correspondent aux simulations et les courbes aux calculs théoriques ajustés pour la distance de dissociation à une contrainte τ_{esc} nulle.*

des forces images notée F_{im}. Par symétrie, les forces images des dislocations partielles de queue exercées sur la dislocation partielle de queue Q_0 se compensent exactement tel que $f_{Q_i} = -f_{Q_{-i}}$. Leur somme sur toutes les images est donc nulle : $\sum_{i=1}^{\infty} f_{Q_i} + f_{Q_{-i}} = 0$. En revanche la somme des forces images des dislocations partielles de tête n'est pas nulle du fait du décalage dû à la distance de dissociation. F_{im} s'écrit alors

$$F_{im} = \sum_{i=1}^{\infty} f_{T_{-i}} + f_{T_i} = \sum_{i=1}^{\infty} K \left(\frac{1}{iL_x - d} - \frac{1}{iL_x + d} \right) = \sum_{i=1}^{\infty} K \frac{2d}{(iL_x)^2 - d^2}. \quad (2.5)$$

avec L_x la taille du système dans la direction de glissement. D'autre part pour tester la rigidité du couplage entre les dislocations partielles, nous faisons varier la distance d. Pour ce faire, nous suivons la procédure effectuée par Duesbery (1998) dans le Cu en exerçant une contrainte τ_{esc} comme indiqué sur la figure 2.16. Cette contrainte, dite d'Escaig, est appliquée perpendiculairement à la direction du vecteur de Burgers d'une dislocation parfaite. Par exemple, pour une dislocation coin nous appliquons une contrainte qui correspond à la contrainte nécessaire pour faire bouger une dislocation vis et inversement. Du fait de l'alternance du signe de $b_\perp$ entre les deux dislocations partielles, la contrainte d'Escaig pousse les deux dislocations partielles dans des directions opposées avec une force par unité de longueur égale à $\tau_{esc} b_\perp$. L'équilibre des forces sur une dislocation partielle prenant en compte à la fois l'effet des images périodiques et l'application de la contrainte τ_{esc} s'écrit désormais :

$$\tau_{esc} b_\perp + \gamma_0 + K \left(\frac{1}{d} + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{2d}{(iL_x)^2 - d^2} \right) = 0. \quad (2.6)$$

En reconnaissant le développement en série entière $\pi \cot \pi x = 1/x + \sum_{i=1}^{\infty} 2x/(n^2 - x^2)$ nous obtenons finalement l'expression de la distance de

dissociation en fonction de la contrainte τ_{esc} prenant en compte les forces images :

$$d = \frac{L_x}{\pi} \arctan\left(\frac{K\pi}{L_x(\gamma_0 - \tau_{esc} b_\perp)}\right). \tag{2.7}$$

Nous choisissons d'ajuster le coefficient d'élasticité $K \to AK$ pour reproduire la distance de dissociation à une contrainte d'Escaig nulle. Le résultat de l'équation 2.7 est alors comparé aux résultats de simulations statiques pour des contraintes -700 MPa $< \tau_{esc} <$ 700 MPa sur la figure 2.17 pour les deux types de dislocations dans les deux matrices de Ni et Al. Le modèle reproduit la variation de la distance de dissociation avec la contrainte d'Escaig de manière satisfaisante en particulier l'anharmonicité de la dissociation avec $\tau_{esc} b$. Il est plus difficile de rapprocher les dislocations partielles que de les éloigner ce qui se traduit sur la figure 2.17 par une pente plus faible pour les petites distances de dissociation. À ce titre les dislocations partielles d'une dislocation coin sont moins couplées qu'une dislocation vis et, pour un même caractère de dislocation, le couplage est plus rigide dans l'Al que dans le Ni. Le modèle atteint par ailleurs ses limites pour des couplages forts et décrit moins bien la dissociation dans la matrice d'Al. Nous remarquons de plus des discontinuités dans les résultats de simulation pour les dislocations de type vis sur la figure 2.17. Ces discontinuités proviennent des vallées de Peierls qui ne sont pas prises en compte dans le modèle.

2.3 Forces de réseau : la contrainte de Peierls

Même dans une matrice métallique pure il existe une résistance aux mouvements des dislocations constituée par la force de réseau. Cette force de réseau ou contrainte de Peierls τ_p provient de la periodicité du cristal. En effet les configurations d'énergie ne sont pas équivalentes au cours du mouvement d'une dislocation du fait de la nature discrète du réseau cristallin. τ_p est donc périodique dans la direction de glissement. Même si dans les cristaux CFC les contraintes de Peierls sont faibles, il convient de les calculer afin d'être en mesure de pouvoir estimer leur contribution dans le calcul de la force d'ancrage d'un obstacle. Pour calculer τ_p, nous imposons une contrainte sur notre système parallèle au vecteur de Burgers de la dislocation suivie d'une relaxation de l'enthalpie de notre système. Ce cycle d'incrément de contrainte suivi d'une relaxation est répété jusqu'à ce que la dislocation avance librement dans la boîte de simulation pour une contrainte égale à τ_p. Dans le Ni, nous obtenons pour la dislocation coin $\tau_{pc}^{Ni} = 0,24$ MPa et pour la dislocation vis $\tau_{pv}^{Ni} = 6,98$ MPa. Nos calculs dans la matrice d'Al nous donnent $\tau_{pc}^{Al} = 1,98$ MPa et $\tau_{pv}^{Al} = 18,44$ MPa pour la dislocation coin et vis respectivement. Nos résultats sont en accord avec ceux obtenus par Wen et al. (2005) dans le Ni et Olmsted et al. (2001) dans l'Al. Ces auteurs utilisent les mêmes potentiels interatomiques mais des conditions aux limites différentes.

Nous retrouvons un résultat classique à savoir que les dislocations des métaux CFC possèdent une contrainte de Peierls relativement faible. De

plus les dislocations vis ont une plus grande friction de réseau que les dislocations coin et cette force de réseau est plus importante dans l'Al que dans le Ni. Ces caractéristiques peuvent être appréhendées par les modèles continus uniquement en considérant une dislocation isolée. Suivant Duesbery (1998), nous pouvons comparer la contrainte effective que nous avons mesurée sur le complexe formé de deux dislocations partielles avec la contrainte calculée pour une dislocation partielle isolée. Pour ce faire, Duesbery suppose un découplage total des dislocations partielles. τ_p pour une dislocation isolée est estimée par la formule de Joos et Duesbery (1997) :

$$\tau_p = \frac{Eb_p}{a'} \exp^{(-2\pi\eta/a')}, \tag{2.8}$$

avec a' la période du réseau dans la direction de glissement en l'absence d'une dislocation. Dans les métaux CFC nous avons pour la dislocation coin $a'_c = b/2$ et $a'_v = \sqrt{3}b/2$ pour la dislocation vis. Dans l'équation 2.8, E est un pré-facteur énergétique dépendant du caractère de la dislocation c'est-à-dire de l'angle β que le vecteur de Burgers fait avec la ligne de dislocation. Il s'écrit $E = \mu(\cos(\beta)^2 + \frac{\sin(\beta)^2}{(1-\nu)})$. En appliquant l'équation 2.8, nous calculons $\tau_{pc}^{Ni} = 4,4.10^{-3}$ MPa, $\tau_{pv}^{Ni} = 102$ MPa, $\tau_{pc}^{Al} = 1,5.10^{-2}$ MPa et $\tau_{pv}^{Al} = 147$ MPa. De manière évidente, nous constatons que cette modélisation sous-estime beaucoup trop τ_p dans le cas d'une dislocation coin et au contraire la surestime exagérément pour une dislocation vis. P. Szelestey et Kaski (2003) et Wen et al. (2005) ont déjà observé la mauvaise estimation de la contrainte de Peierls des modèles continus par rapport à leurs résultats de simulations atomistiques. L'équation 2.8 est trop sensible vis-à-vis de l'estimation de η du fait de la fonction exponentielle. Elle possède seulement une valeur heuristique grâce à laquelle nous retrouvons bien $\tau_{pc}^{Ni} < \tau_{pc}^{Al} < \tau_{pv}^{Ni} < \tau_{pv}^{Al}$.

Comme l'ont montré Szelestey et al. (2005) la contrainte de Peierls d'une dislocation dissociée dépend fortement du couplage entre dislocations partielles. Pour moduler ce couplage, ils appliquent une contrainte d'Escaig et calculent τ_p. Théoriquement τ_p peut même s'annuler si les deux dislocations partielles sont rigidement liées et que leur distance de séparation est commensurable avec une distance et demie entre vallées de Peierls. Une des dislocations partielles se trouve au sommet du potentiel de Peierls tandis que la seconde est au fond de la vallée. La première pousse alors la seconde d'une quantité exactement suffisante pour la faire avancer. Cette situation idéale n'est toutefois jamais totalement réalisée même si pour ce type de couplage τ_p est fortement diminuée. Dans un modèle de P-N généralisé à deux dimensions Schoeck et Krystian (2005) montrent également que τ_p dépend de la réaction de dissociation des dislocations partielles et qu'au cours de son glissement la dislocation change de distance de dissociation. D'autres modèles semi-discrets comme celui proposé par Bulatov et Kaxiras (1997) ont été développés pour pouvoir prendre en compte la nature discrète du réseau mais ils n'ont pas d'expression analytique.

Il existe des mesures expérimentales de la contrainte de Peierls réali-

sées sur des monocristaux à une température cryogénique. Ces mesures sont très sensibles à la pureté des échantillons ainsi qu'à l'orientation de ces derniers provoquant une dispersion importante des mesures de τ_p. Dans le Ni à une température de 20K, Haasen (1958) mesure $9 < \tau_p^{Ni} < 11$ MPa. Didenko et Pustovalov (1973) observent $\tau_p^{Al} = 5$ MPa dans l'Al refroidi à 1.2K. Nos résultats numériques sont donc du même ordre de grandeur que ceux mesurés expérimentalement à l'exception notable de la dislocation vis dans la matrice d'Al. La surestimation de cette contrainte τ_{pv}^{Al} provient probablement d'un artefact du potentiel interatomique utilisé.

2.4 Tension de ligne des dislocations

La tension de ligne est une autre propriété importante des dislocations caractérisant leur rigidité. Elle sert notamment de paramètre d'entrée aux modèles de DSS présentés dans le chapitre 1 (cf. section 1.2.1 page 29). Au travers des simulations atomistiques il n'est pas possible de calculer directement la rigidité d'un segment de dislocation. En revanche, les simulations peuvent être employées pour analyser la forme des dislocations quand ces dernières sont ancrées sur des obstacles. À une contrainte appliquée donnée, l'amplitude de flexion des dislocations nous indique leurs rigidités. Plus les dislocations restent droites sous contrainte, plus elles sont rigides. Pour quantifier la rigidité nous pouvons analyser la forme de la dislocation donnée par les simulations dans le cadre d'un modèle de ligne élastique nommé modèle de tension de ligne. Ce modèle d'élasticité locale suppose que l'accroissement d'énergie d'une dislocation se déduit uniquement de l'accroissement de sa longueur. En négligeant l'interaction de la dislocation avec elle-même (Hirth et al. 1966), ce modèle permet un traitement analytique pour certaines configurations de dislocation. La configuration la plus simple consiste à considérer une dislocation ancrée sur une chaîne régulière d'obstacles le long de la ligne de dislocation. Dans nos simulations atomistiques, du fait des conditions périodiques dans la direction de la ligne de dislocation $\vec{Y}$, l'introduction d'un seul obstacle nous permet de construire une chaîne régulièrement espacée d'obstacles dont la distance inter-obstacle est fixée par L_y. Les configurations ancrées pour les différents types de dislocations sont calculées pour plusieurs contraintes appliquées τ_{app}. Afin de couvrir une gamme importante de paramètres τ_{app} et L_y, nous introduisons dans les simulations atomiques un obstacle incisaillable en gelant la position de deux atomes premiers voisins de part et d'autre du plan de glissement. La dislocation peut par conséquent fléchir de manière importante sans pour autant franchir l'obstacle même pour de grandes valeurs de τ_{app} et L_y. Nous simulons également la situation inverse où au contraire la dislocation reste droite quand τ_{app} et L_y sont faibles.

Nous faisons l'hypothèse de dislocations partielles rigidement liées et nous analysons la position moyenne des dislocations de sorte que nous pouvons considérer une seule dislocation ancrée entre deux obstacles ponctuels A et B comme représentée schématiquement sur la figure 2.18. Dans sa position d'équilibre, la dislocation fléchit dans le plan de glisse-

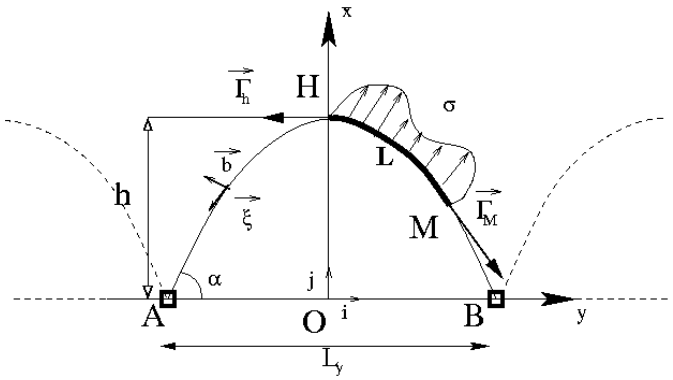


FIGURE 2.18 – *Vue schématique de la flexion d'une dislocation dans son plan de glissement ancrée entre deux obstacles A et B subissant une contrainte extérieure σ.*

ment $(O, \vec{i}, \vec{j})$. O est l'origine du repère dont l'abscisse correspond au point de flexion maximale prise par la dislocation noté H de cordonnées $(0, h)$. Un champ de contraintes σ est exercé sur la dislocation. La formule de Peach-Koehler $(\sigma.\vec{b}) \times \vec{\xi}$ nous donne la force par unité de longueur subie par la dislocation se réduisant à τb avec τ la contrainte résolue de glissement. $\vec{\xi}$ est le vecteur tangent à la ligne de dislocation. Pour tous points $M(x, y)$ le long de la dislocation, une tension de ligne $\Gamma_M \vec{\xi_M}$ tend à ramener la dislocation dans une position droite. Si nous considérons une portion de dislocation $[HM]$ de longueur L, nous pouvons écrire l'équilibre entre la force due à la contrainte σ et les tensions au point H, notée $\Gamma_H \vec{\xi_H}$ et au point M, notée $\Gamma_M \vec{\xi_M}$. Nous obtenons la relation vectorielle $\Gamma_M \vec{\xi_M} + \Gamma_H \vec{\xi_H} + (\sigma.\vec{b}) \times \vec{\xi} = 0$, laquelle se réduit après projection sur les axes à :

$$tan\varphi = \tau b L / \Gamma_H, \tag{2.9}$$

en éliminant Γ_M. Dans l'équation 2.9, φ est l'angle formé par $(\vec{i}, \vec{\xi})$. Dans le but de déterminer la forme de la dislocation sous une forme cartésienne $x = f(y)$ avec x et y les coordonnées de M, nous différencions l'équation 2.9 : $d(tan\varphi) = (\tau b / \Gamma_H) dL$, et notant que $tan\varphi = dx/dy$ et que $dL^2 = dx^2 + dy^2$, nous obtenons :

$$\frac{1}{\sqrt{1 + x'^2}} \frac{d^2x}{dy^2} = \frac{\tau b}{\Gamma}, \tag{2.10}$$

où $\Gamma_H = \Gamma$ est définie comme la tension de ligne de la dislocation. Afin de trouver une solution analytique à l'équation 2.10, nous supposons que la contrainte est constante en négligeant la contrainte de Peierls et le champ de contrainte des dislocations images causé par les conditions aux limites périodiques. Dans ces conditions τ est constant et correspond à la contrainte de cisaillement appliquée au système τ_{app}. En posant $u = x'$ l'équation 2.10 se réduit à une équation différentielle du premier ordre et après intégration nous obtenons

$$\int \frac{u'(y)}{\sqrt{1 + u(y)^2}} dy = ln(u(y) + \sqrt{1 + u(y)^2}) + C. \tag{2.11}$$

En remarquant que $x' = u = 0$ au point d'abscisse $y = 0$ la constante

d'intégration est C nulle. Nous inversons l'équation 2.11 :

$$x' = \frac{e^{y(\tau_{app}b/\Gamma)} - e^{-y(\tau_{app}b/\Gamma)}}{2}. \tag{2.12}$$

Avec le choix des coordonnées reportées sur la figure 2.18, nous avons $x(L_y/2) = x(L_y/2) = 0$ et la solution finale de la forme de la dislocation est donnée par la fonction $x(y) = f(y, \tau_{app})$ tel que :

$$f(y, \tau_{app}) = \frac{\Gamma}{\tau_{app}b}\left[\cosh(\frac{\tau_{app}bL_y}{2\Gamma}) - \cosh(\frac{\tau_{app}by}{\Gamma})\right]. \tag{2.13}$$

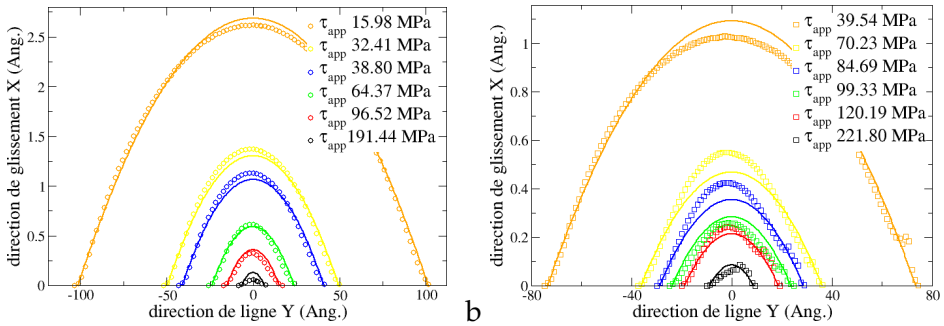


FIGURE 2.19 – *Flexion d'une dislocation coin (a) et vis (b) dans le nickel en fonction de la distance inter-obstacles L_y et de la contrainte appliquée τ_{app}. Les symboles correspondent aux simulations et les courbes à la modélisation de l'équation 2.13 dont la tension de ligne est issue de l'ajustement de la figure 2.20.*

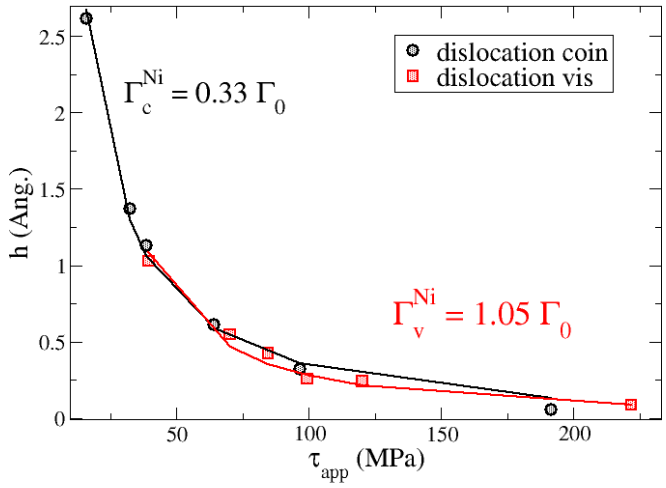


FIGURE 2.20 – *Déflexion maximale d'une dislocation coin (◯) et vis (□) dans le nickel en fonction de la distance inter-obstacles L_y et de la contrainte appliquée τ_{app}. Les symboles correspondent aux simulations reportées sur les figures 2.19 et les courbes à leurs ajustements sur l'équation 2.14.*

À partir des configurations ancrées de dislocation nous pouvons alors calculer la tension de ligne effective par une procédure d'ajustement. Plusieurs couples de paramètres (L_y, τ_{app}) sont utilisés pour simuler la

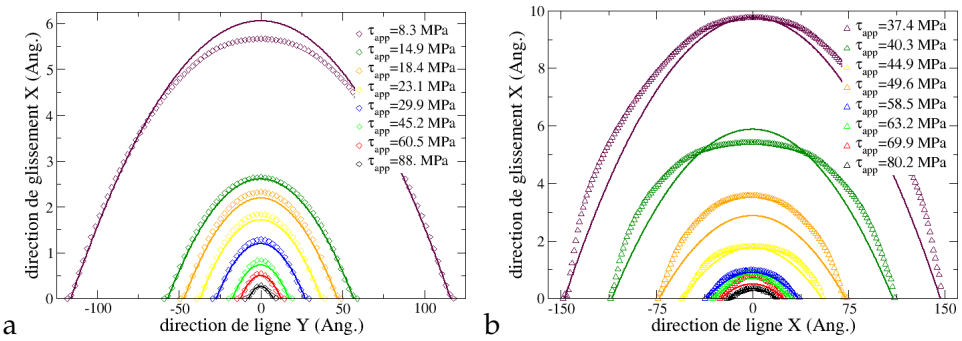


FIGURE 2.21 – *Flexion d'une dislocation coin (a) et vis (b) dans l'aluminium en fonction de la distance inter-obstacles L_y et de la contrainte appliquée τ_{app}. Les symboles correspondent aux simulations et les courbes à la modélisation de l'équation 2.13 dont la tension de ligne est issue de l'ajustement de la figure 2.22.*

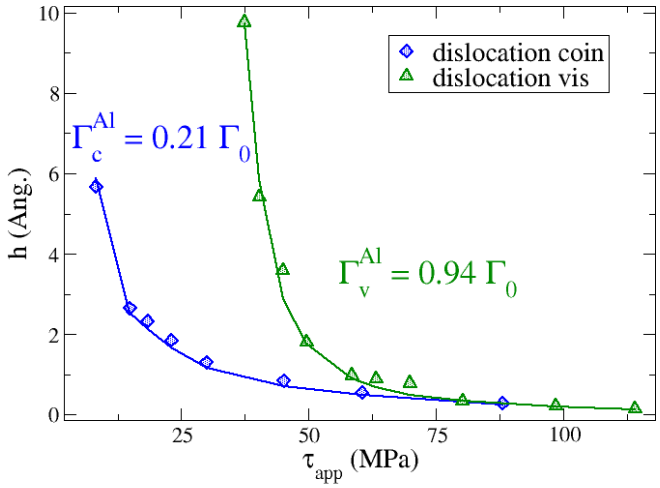


FIGURE 2.22 – *Déflexion maximale d'une dislocation coin (◇) et vis (△) dans l'aluminium en fonction de la distance inter-obstacles, L_y et de la contrainte appliquée τ_{app}. Les symboles correspondent aux simulations reportées sur les figures 2.21 et les courbes à leurs ajustements sur l'équation 2.14.*

flexion d'une dislocation sur une chaîne régulière d'obstacles. Les positions moyennes des dislocations ancrées sont reportées pour les dislocations coin et vis sur les figures 2.19 (a) et (b) pour la matrice de Ni et sur les figures 2.21 (a) et (b) pour la matrice d'Al. Nous déterminons la position moyenne d'une dislocation à partir d'un déplacement à travers le plan de glissement égal à $b/2$ qui nous est fourni par la fonction $D(x)$ (cf. équation 2.3 page 55). L'ajustement de la tension de ligne Γ est réalisé sur les coordonnées du point d'abscisse nulle de plus grande flexion h suivant l'équation :

$$h = f(0, \tau_{app}) = \frac{\Gamma}{\tau_{app} b} \left[cosh(\frac{\tau_{app} b L_y}{2\Gamma}) - 1 \right]. \tag{2.14}$$

Enfin, pour comparer la simulation et le modèle de tension de ligne, nous prenons en compte la condition d'encastrement au niveau de l'obstacle où la dislocation ne peut se fléchir librement. Pour ce faire, nous utilisons dans l'équation 2.14 $L_y - c$ au lieu de L_y avec c la largeur de l'obstacle simulé. Les résultats de l'ajustement de la flexion maximale h sont reportés sur les courbes des figures 2.20 et 2.22 pour les deux caractères de dislocation dans le Ni et l'Al. Nous choisissons de normaliser la tension de ligne ainsi calculée par l'estimation classique $\Gamma_0 = 0,5\mu b^2$ donnée par Nabarro (1967). Nous obtenons pour la dislocation coin $\Gamma_c^{Ni} = 0,33\Gamma_0$ et vis $\Gamma_v^{Ni} = 1,05\Gamma_0$ dans le Ni tandis que dans la matrice d'Al nous calculons $\Gamma_c^{Al} = 0,21\Gamma_0$ et $\Gamma_v^{Al} = 0,94\Gamma_0$ pour une dislocation coin et vis respectivement. Ce calcul doit être interprété comme une moyenne de la tension de ligne effective sur les configurations explorées. Comme attendu les dislocations vis sont plus rigides que les dislocations coin. Nous observons de plus que les tensions de ligne effectives des dislocations de caractère coin dévient assez largement de l'approximation classique Γ_0 ce qui rend le type d'approche développé ici nécessaire dans les systèmes de taille finie.

Nous réalisons l'opération inverse en traçant sur les figures 2.19 et 2.21 les prédictions du modèle de tension de ligne à l'aide de la tension de ligne effective Γ que nous venons de calculer. Nous observons un accord satisfaisant entre la description de la flexion du modèle et les résultats obtenus par des simulations. Cependant les lacunes du modèle doivent être soulignées. Ainsi nous observons certaines divergences entre les simulations et le modèle de tension de ligne pour la dislocation vis dans l'Al. Elles proviennent dans ce cas de la contrainte de Peierls qui pousse ou retient localement la dislocation et que nous avons négligée dans le développement du modèle. D'autre part, nous notons que pour des flexions trop importantes la tension de ligne effective diverge par rapport à notre estimation. Du fait de l'interaction élastique de la dislocation avec elle-même ainsi qu'avec ses images périodiques, la tension de ligne effective croît avec la flexion de la dislocation.

Vijay et al. (1997) calculent la tension de ligne de la dislocation vis dans l'Al en utilisant le même potentiel interatomique dans un système de forme cylindrique dont le rayon est comparable avec l'épaisseur L_z de nos simulations. Ils prennent en compte théoriquement l'effet des bords ri-

gides fixés sur le déplacement d'une dislocation de Volterra dans le calcul de la tension de ligne. Ils trouvent une valeur de tension de ligne comprise entre $\Gamma_v^{Al} = 0,78\Gamma_0$ et $\Gamma_v^{Al} = 1,14\Gamma_0$ assez proche de notre estimation en dépit de conditions aux limites très différentes. Une autre estimation de la tension de ligne des dislocations est donnée par la théorie élastique (Friedel 1964) (Hirth et Lothe 1982). Le traitement le plus simple consiste à négliger l'interaction de la dislocation avec elle-même et ses images. Il suppose que l'énergie par unité de longueur d'une dislocation courbée est la même qu'une dislocation originalement droite. Suivant ces approximations, la tension de ligne d'une dislocation s'écrit simplement comme l'énergie de ligne d'une dislocation et dans un cylindre infini de rayon R elle donne $\Gamma_{el} = E\ln(\frac{R}{r_o})$ avec E un préfacteur énergétique dépendant du caractère de la dislocation et r_o le rayon de cœur de la dislocation (Foreman 1955). De Wit et Koelher (1959) ont amélioré ce modèle très simplifié en prenant en compte la variation de l'énergie de ligne d'une dislocation avec son caractère lors de son fléchissement. Ce développement est exprimé comme précédemment en terme d'énergie de ligne au travers du terme $E(\beta)$ fonction du seul angle β entre la dislocation et le vecteur de Burgers. Leur modèle démontre la différence de tension de ligne entre segment de dislocation vis et segment de dislocation coin. Dans nos simulations atomistiques, le rayon limite d'intégration de l'énergie élastique correspond à la distance par rapport aux surfaces libres c'est-à-dire $L_z/2$. L'estimation de la tension de ligne par la théorie élastique s'écrit par conséquent pour notre taille de système simulé :

$$\Gamma_{el} = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)}\left[(1+\nu)\cos^2\beta + (1-2\nu)\sin^2\beta\right] ln(\frac{L_z}{2r_0}). \tag{2.15}$$

Afin d'obtenir une approximation de la tension de ligne la plus précise possible, nous calculons l'équation 2.15 en utilisant un rayon de cœur cohérent avec l'étalement des cœurs η calculé précédemment. En suivant l'estimation donnée par Hirth et Lothe (1982), $r_o = 2\eta_c/\exp(1+\gamma)$ et $r_o = 2\eta_v/\exp(1)$ où $\gamma = (1-2\nu)/(4(1-\nu))$ pour les dislocations de type coin et vis respectivement. Nous obtenons les tensions de ligne calculées à partir de l'équation 2.15 : $\Gamma_c^{Ni} = 0,22\Gamma_0$, $\Gamma_v^{Ni} = 0,87\Gamma_0$, $\Gamma_c^{Al} = 0,19\Gamma_0$ et $\Gamma_v^{Al} = 0,82\Gamma_0$ en accord raisonnable en comparaison des résultats précédemment obtenus par notre procédure d'ajustement. Nous remarquons que cette estimation sous-estime la rigidité effective ce qui paraît normal du fait de la non-prise en compte de la rigidité associée aux cœurs de dislocation. Nous soulignons également que plus la dislocation est éloignée d'une configuration droite moins cette approche élastique est justifiée. Finalement, il est important de noter que la tension de ligne effective calculée dans ce chapitre intègre la rigidité de chacune des dislocations partielles ainsi que leur interaction. Nous pouvons donc nous attendre à ce que la tension de ligne d'une dislocation partielle soit plus faible que celle calculée ici.

Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre nous avons exposé le système de dislocation et la méthode numérique que nous allons employer pour étudier le DSS. Nous

avons décrit les géométries et les propriétés physiques élémentaires des dislocations glissiles des métaux CFC dans deux matrices pures de Ni et Al.

Il apparaît que les dislocations se dissocient en deux dislocations partielles dont les cœurs, concentrant la déformation, s'étalent dans les plans de glissement $\{111\}$. Le paramétrage du champ de déplacement est obtenu en ajustant ce champ sur celui d'une dislocation de type P-N. L'étalement des cœurs et la distance de dissociation sont moins importants pour les dislocations vis que pour les dislocations coin. Pour un même caractère de dislocation, ils sont plus petits dans l'Al que dans le Ni. Ces propriétés se traduisent par une réaction de dissociation incomplète par rapport aux dislocations partielles de Shockley. À l'exception de la dislocation vis dans l'Al, les contraintes de Peierls calculées sont relativement faibles et peuvent être reliées à l'étalement des cœurs des dislocations partielles.
Le couplage des dislocations partielles est modélisé par deux dislocations de Volterra séparées par une faute d'empilement en prenant en compte les conditions aux limites périodiques dans la direction de glissement. Les dislocations vis sont plus rigidement couplées et, à caractère de dislocation constant, le couplage est plus fort dans l'Al que dans le Ni.
Nous avons également modélisé la rigidité des dislocations dans l'approximation de la tension de ligne. Les tensions de ligne effectives calculées indiquent des dislocations vis environ 4 fois plus rigides que les dislocations coin.

Nous disposons à présent de quatre systèmes différents composés de deux types de dislocations, coin et vis, dans deux matrices CFC de Ni et l'Al pour lesquels nous avons caractérisé les dislocations. Nous pouvons désormais ajouter des atomes de soluté dans les matrices métalliques et étudier leurs interactions avec les dislocations.

Description de l'interaction dislocation-soluté

3

Sommaire

3.1 Origines de l'ancrage d'une dislocation par un atome de soluté . . . 73
3.1.1 Effet de taille . . . 73
3.1.2 Effet de module . . . 74
3.1.3 Effet Suzuki . . . 75
3.1.4 Théorie élastique de l'interaction . . . 77
3.2 Force d'ancrage d'un obstacle . . . 80
3.2.1 Calcul de la force d'ancrage . . . 80
3.2.2 Influence de la position du soluté sur la force d'ancrage . 85
3.2.3 Influence de la distance entre soluté et plan de glissement sur la force d'ancrage . . . 86
3.2.4 Force d'ancrage des paires de solutés . . . 88
3.3 Portée d'interaction de l'ancrage . . . 92
3.3.1 Calcul de la portée . . . 92
3.3.2 Origine physique de la portée d'interaction . . . 94
Conclusion . . . 95

Dans le chapitre précédent, nous avons caractérisé les dislocations des matrices métalliques pures de Ni et d'Al. Nous pouvons désormais nous pencher sur l'origine du DSS, c'est-à-dire sur l'ancrage des dislocations par les atomes de soluté. L'objectif de ce chapitre est de décrire l'interaction entre une dislocation et un soluté isolé dans les alliages de Ni(Al) et Al(Mg) en identifiant les paramètres pertinents de cette interaction.

Pour cela, nous étudions les différentes origines de l'interaction entre les impuretés et les dislocations. Lorsque c'est possible, c'est-à-dire loin du plan de glissement, nous modélisons grâce à la théorie élastique l'interaction entre un soluté d'Al et une dislocation dans une matrice de Ni. Les modèles analytiques de DSS prédisent la limite d'écoulement à partir d'obstacles élémentaires situés dans le plan de glissement définis par leur force d'ancrage et leur portée d'interaction. Pour mesurer ces paramètres,

nous réalisons des calculs atomistiques du potentiel d'interaction entre atome de soluté et dislocation pour les deux types de dislocations dans les deux alliages modèles.
Nous analysons l'influence de la position des solutés sur les forces d'ancrages. Nous définissons un estimateur de la portée d'interaction d'un obstacle avec une dislocation nécessaire à l'application dans les modèles de DSS.
Enfin, comme dans une solution solide concentrée, les dislocations interagissent avec des solutés qui ne sont pas isolés, nous nous intéressons à l'interaction des dislocations avec les paires de solutés.

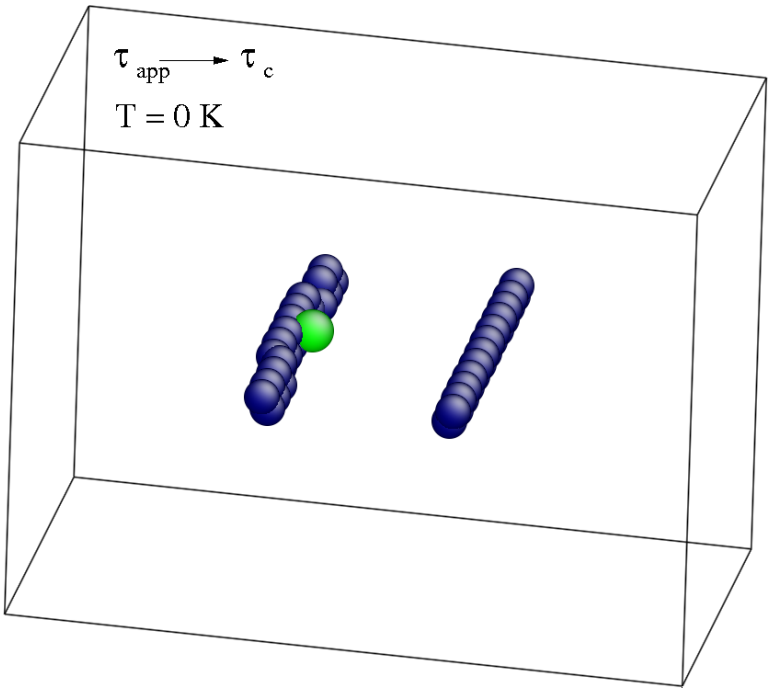


FIGURE 3.1 – *Image caractéristique des simulations de relaxation décrites dans ce chapitre. La contrainte imposée croît jusqu'à la contrainte critique. Les atomes représentés appartiennent aux dislocations partielles (bleu foncé). La dislocation est ancrée par l'interaction de sa dislocation partielle de queue sur un atome de soluté substitutionnel (vert clair).*

3.1 Origines de l'ancrage d'une dislocation par un atome de soluté

L'interaction entre dislocation et soluté possède plusieurs origines qu'il est important de pouvoir caractériser. Leur description permet de prévoir l'intensité du DSS en fonction des propriétés physiques des solutés et de la matrice. Pour décrire le problème de l'interaction entre l'impureté et les dislocations contenues dans le cristal, nous procédons en trois étapes en séparant les effets de taille, de module et de faute d'empilement comme représenté sur le schéma 3.2.

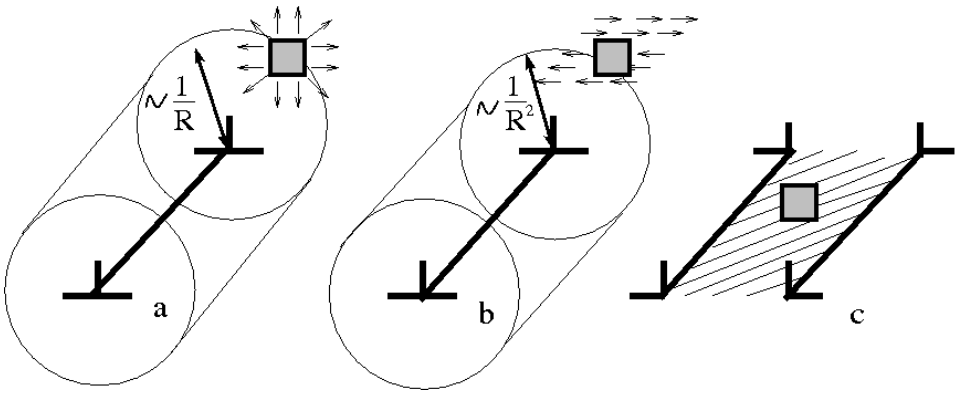


Figure 3.2 – *Les différentes origines de l'ancrage des dislocations par les solutés : a) effet de taille, b) effet de module, c) interaction avec la faute d'empilement dit effet Suzuki.*

À partir des propriétés des éléments purs, il est possible de retrouver les quantités qui permettent d'évaluer qualitativement l'interaction dislocation-soluté telles que les énergies internes, la variation du paramètre de maille moyen ou encore les constantes élastiques. Néanmoins pour pouvoir interpréter les résultats de nos simulations plus précisément, il est plus pertinent de mesurer les paramètres effectifs des potentiels interatomiques que nous utilisons. Nous simulons deux alliages modèles de Ni(Al) et Al(Mg) dont les potentiels interatomiques ont été développés respectivement par Rodary et al. (2004) et Liu et al. (1996) (cf. section A.1 page 177).

3.1.1 Effet de taille

L'effet de taille dans l'interaction dislocation-soluté, appelée interaction para-élastique, a été décrit par Cottrell (1947) pour expliquer la formation des atmosphères de soluté autour des dislocations. L'atome d'impureté est décrit selon le modèle d'une cavité sphérique dans une matrice pure. La matrice et l'impureté sont considérées comme deux milieux élastiques continus et homogènes de propriétés physiques différentes. Si un atome d'impureté de mêmes constantes élastiques que la matrice mais de paramètre de maille différent est dissout dans la matrice il génère une pression. L'interaction avec une dislocation provient alors de l'interaction des champs de pression hydrostatiques des deux défauts, dislocation et soluté.

Supposons une dislocation infinie droite glissant dans la direction x et interagissant avec un atome de soluté situé à une hauteur z du plan de glissement. L'énergie d'interaction dislocation-soluté due à l'effet de taille $E_a(x,z)$ s'exprime comme le travail nécessaire pour placer un soluté dans le champ de pression d'une dislocation. Dans la théorie élastique linéaire cette énergie s'écrit (Hirth et Lothe 1982) :

$$E_a(x,z) = v_a p(x,z), \tag{3.1}$$

avec v_a le volume de formation du soluté et p la pression hydrostatique de la dislocation à l'emplacement du soluté. p se déduit des termes diagonaux σ_{ii} de la matrice des contraintes comme $p = \sum_{ii} \sigma_{ii}/3$. À cause de la symétrie sphérique, le travail provient de la seule composante hydrostatique p du champ de contrainte de la dislocation. E_a est donc nul pour une dislocation vis pure.

La différence de taille entre les atomes de la matrice et les atomes de soluté est caractérisée dans le cas isotrope par le paramètre de désaccord de taille $\epsilon_a = \delta a / a\delta c$ avec a le paramètre de maille et c la concentration en atomes de soluté. Connaissant la loi de Vegard c'est-à-dire $\delta a/\delta c$ il est possible de calculer le volume de relaxation du soluté comme $v_a = v3\delta a/\delta c$ avec $v = a^3/4$ le volume d'un atome de la matrice. Nous calculons la variation du paramètre de maille à l'équilibre en fonction de la concentration en soluté pour en déduire v_a. Une seconde méthode consiste à calculer directement le volume de relaxation d'un atome de soluté dans une simulation à pression nulle en faisant la différence de volume d'une boîte de simulation tri-périodique avant et après l'introduction d'un seul atome de soluté. Nous obtenons des valeurs de v_a semblables pour les deux méthodes. Le résultat du calcul du paramètre de désaccord de taille est égal à $\epsilon_a^{Ni(Al)} = 0,074$ dans l'alliage de Ni(Al) et à $\epsilon_a^{Al(Mg)} = 0,106$ dans l'alliage d'Al(Mg). Le calcul direct du volume de relaxation nous donne $v_a^{Ni(Al)} = 2,17$ Å^3 pour un soluté d'Al dans le Ni et $v_a^{Al(Mg)} = 4,74$ Å^3 pour un soluté de Mg dans l'Al.

Dans les deux alliages que nous simulons les atomes de soluté sont plus gros que les atomes de solvant et dilatent les matrices. Les impuretés repoussent par conséquent les parties en compression et attirent les parties en extension de la matrice soumise au champ de contrainte de la dislocation. D'après l'équation 3.1, la portée d'interaction due à l'effet de taille suit la portée du champ de pression de la dislocation en $1/R$ avec $R = \sqrt{x^2 + z^2}$ la distance par rapport au centre de la dislocation. Cette interaction s'exerce donc à longue portée.

3.1.2 Effet de module

L'effet de module a été traité par Eshelby (1957) dans le problème d'une inclusion ellipsoïdale uniformément déformée dans une matrice élastique isotrope, infinie, uniformément sollicitée à l'infini. En considérant l'introduction d'un atome de soluté comme une inclusion modifiant localement la rigidité de la matrice, l'interaction dislocation-soluté peut être traitée à partir de la solution d'Eshelby.

L'énergie d'interaction due à l'effet de module, dite énergie di-élastique, provient du désaccord des modules élastiques entre matrice et soluté. Cette énergie d'interaction notée $E_\mu(x,z)$ s'exprime comme le travail nécessaire pour placer un soluté dans le champ de contrainte d'une dislocation de la matrice de modules différents. Dans la théorie élastique linéaire elle s'écrit

$$E_\mu(x,z) = -v\sigma_{ij}(x,z)\left(\frac{\partial S_{ijkl}}{\partial c}\right)_\sigma \sigma_{kl}(x,z), \tag{3.2}$$

avec S_{ijkl} les modules de complaisance et σ_{kl} les éléments de la matrice des contraintes générées par la dislocation. $E_\mu(x,z)$ exprime la différence d'énergie élastique stockée dans le volume du soluté entre systèmes avec et sans soluté.

Il existe deux formulations de E_μ basées sur les déformations ou sur les contraintes. Dans l'équation 3.2, nous avons choisi la formulation basée sur les contraintes car elle nous permet de calculer à partir des contraintes seules E_a et E_μ. Dans la formulation basée sur les déformations, l'énergie d'interaction est proportionnelle à la différence des constantes élastiques, et au carré de la déformation due à la dislocation. Ainsi définie, et en faisant l'hypothèse d'un coefficient de Poisson constant, il est possible d'écrire E_μ en fonction de la variation du module de cisaillement μ avec la concentration. C'est pourquoi, comme pour l'effet de taille, il a été défini classiquement dans la littérature un paramètre de désaccord de module $\epsilon_\mu = d\mu/\mu dc$ caractéristique de l'intensité de l'interaction. Nous réalisons le calcul des trois constantes élastiques indépendantes dans les deux alliages en fonction de la concentration en soluté. Nous calculons alors μ défini comme la moyenne de Voigt en fonction de la concentration en soluté. μ dépend linéairement de la concentration pour les deux solutions solides modèles (cf. A.2 pageA.2). Nous obtenons $\epsilon_\mu^{Ni(Al)} = -1,97$ et $\epsilon_\mu^{Al(Mg)} = -2,6$ respectivement pour la solution solide de Ni(Al) et Al(Mg). L'ajout de soluté diminue la rigidité des deux alliages simulés. L'effet de module a donc tendance à produire une attraction des dislocations vers les solutés.

La force d'interaction due aux effets de module est un ordre de grandeur plus faible que celle due aux effets de taille pour la dislocation coin pure. En revanche pour une dislocation vis non dissociée, c'est l'unique interaction car le champ de contrainte associé à une dislocation vis pure dans la théorie linéaire isotrope ne comprend pas de partie hydrostatique pouvant interagir par effet de taille comme nous l'avons vu précédemment. À partir de l'équation 3.2, la portée d'interaction due à l'effet de module est identique à la portée du carré du champ de contrainte de la dislocation. σ_{ij} varie comme $1/R$. Cette interaction s'exerce donc en $1/R^2$ et est considérée comme une interaction à courte portée.

3.1.3 Effet Suzuki

Suzuki (1957) a développé une théorie du DSS basée sur la concentration à l'équilibre autour des segments de dislocation. Pour Suzuki, c'est la ségrégation à l'équilibre des solutés sur les dislocations dissociées qui

explique une partie importante de la contrainte d'écoulement observée dans les métaux CFC à température ambiante. Son calcul comprend un nouveau terme d'énergie de liaison entre le soluté et la dislocation en intégrant l'interaction entre les impuretés et la faute d'empilement. Suzuki montre que, dans le cadre d'un alliage binaire régulier CFC, l'énergie libre d'un atome de soluté diminue lorsqu'il est placé dans la faute d'empilement. Cette tendance est confirmée expérimentalement pour certains alliages comme ceux de Cu et Ag pour lesquels Vassamillet et Massalski (1963) et Liu et Gallagher (1971) ont observé une décroissance de l'énergie de faute d'empilement avec la concentration en soluté.

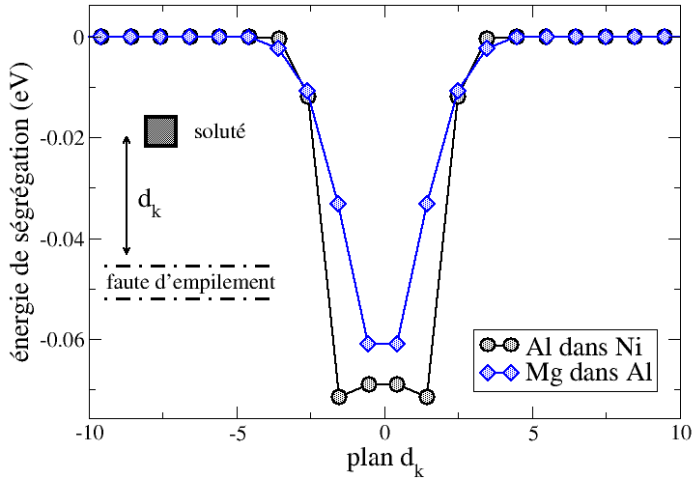


FIGURE 3.3 – *Énergie de ségrégation d'un atome de soluté sur une faute d'empilement. L'énergie est tracée en fonction de la distance à la faute d'empilement en nombre de plans atomiques. Les symboles circulaires correspondent à l'alliage de Ni(Al), les losanges à l'alliage d'Al(Mg).*

La diminution de l'énergie de faute d'empilement stabilise le soluté dans le ruban de faute et peut entraîner un ancrage supplémentaire de la dislocation. Nous voulons par conséquent estimer l'énergie de liaison ainsi que la portée de l'interaction entre un atome de soluté et une faute d'empilement intrinsèque de la matrice. Pour cela, nous introduisons une faute d'empilement intrinsèque dans une boîte de simulation tri-périodique en décalant une partie du cristal d'un vecteur de dislocation partielle de Shockley parallèlement à un plan $(1\bar{1}1)$. Ce décalage crée une phase HCP d'une épaisseur égale à deux plans cristallins correspondant à une faute d'empilement. Nous substituons un atome de soluté à un atome de matrice situé à une distance variable du plan de la faute d'empilement. Nous relaxons alors l'énergie potentielle de ce système. Le calcul de l'énergie potentielle est réalisé en fonction de la distance entre la faute d'empilement et l'atome de soluté. La référence de l'énergie du système nous est fournie par l'énergie potentielle pour laquelle le soluté est situé loin de la faute d'empilement. L'énergie de ségrégation du soluté sur la faute d'empilement ainsi calculée est reportée sur la figure 3.3 pour les

deux alliages.

Nous constatons que l'énergie de ségrégation diminue nettement en rapprochant l'atome de soluté de la faute d'empilement. Cette énergie de ségrégation est plus importante pour un soluté d'Al interagissant avec une faute d'empilement d'une matrice de Ni que celle d'un soluté de Mg interagissant avec une faute d'empilement d'une matrice d'Al. Nous pouvons donc nous attendre à une plus importante diminution de l'énergie de faute d'empilement avec la concentration en soluté dans l'alliage de Ni(Al) que dans l'alliage d'Al(Mg). D'après la figure 3.3, la portée de l'interaction soluté-faute d'empilement peut être estimée à trois plans interatomiques pour les deux alliages. Au-delà de cette distance l'énergie de ségrégation ne varie quasiment plus.

Nous notons que l'énergie de ségrégation calculée ici ne correspond pas exactement à la variation d'énergie d'un atome de soluté visitant le cœur d'une dislocation dissociée. En effet, comme nous l'avons vu dans le chapitre 2, le chemin de dissociation entre deux dislocations partielles est continu et le ruban de faute n'est pas strictement une phase HCP. L'énergie d'interaction soluté-faute d'empilement varie donc continûment au cours du glissement de la dislocation. D'autre part, dans la géométrie de notre boîte de simulation, le ruban de faute d'une dislocation interagit avec les surfaces du cristal. La relaxation des contraintes provenant du ruban de faute d'empilement ne s'opère pas de la même manière que dans un système tri-périodique sans surface. La figure 3.3 nous donne donc une estimation de l'interaction soluté-faute d'empilement. Pour obtenir quantitativement l'énergie d'interaction effective soluté-faute d'empilement dans les simulations contenant une dislocation, il serait nécessaire de prendre en compte le chemin de dissociation des dislocations ainsi que l'effet des surfaces.

3.1.4 Théorie élastique de l'interaction

Il est intéressant de pouvoir modéliser l'interaction dislocation-soluté par une théorie continue. En outre, le comportement macroscopique d'un matériau implique souvent une évolution collective des dislocations ce qui peut conduire à des temps de calcul prohibitifs pour les simulations à l'échelle atomique. Il est donc utile de modéliser les interactions entre les solutés et les dislocations via la théorie élastique ce qui peut servir à plus grande échelle, par exemple dans les simulations de DDD. La théorie élastique a notamment été employée pour décrire l'interaction d'une dislocation avec les lacunes (Bullough et Newman 1962, Bullough et Willis 1975, Clouet 2006), les auto-interstitiels (Liu et al. 2008) et les atomes de soluté (Boser 1973b, Argon 2007, Clouet et al. 2008). Nous souhaitons comparer ici les résultats de la théorie élastique avec ceux de nos simulations atomistiques pour l'interaction entre une dislocation et un atome de soluté.

Nous étudions l'interaction des dislocations dans le Ni avec un atome d'Al éloigné du plan de glissement. Nous choisissons de placer l'atome

de soluté à une distance de trois plans cristallins du plan de glissement de sorte que la théorie élastique reste valide pour décrire l'interaction dislocation-soluté.

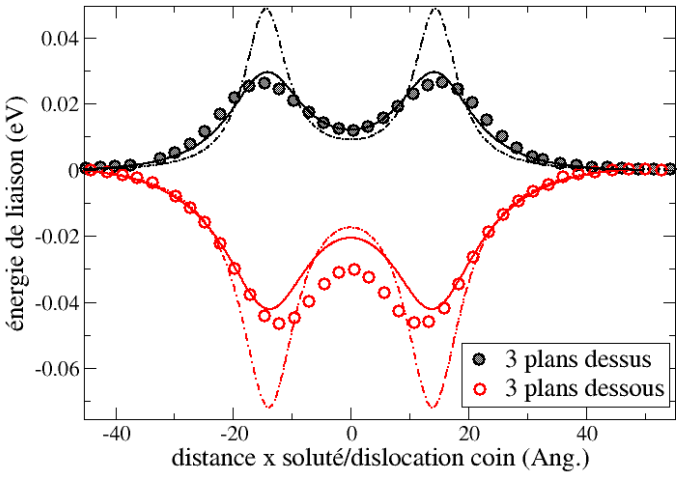


FIGURE 3.4 – *Énergie de liaison entre une dislocation coin et un atome d'aluminium dans le nickel en fonction de la position moyenne de la dislocation dans son plan de glissement. Les symboles correspondent aux résultats de simulations pour un soluté situé trois plans au-dessus (symboles pleins) et au-dessous (symboles ouverts) du plan de glissement. La modélisation élastique est présentée pour une dislocation de type Volterra (courbes discontinues) et pour une dislocation de type Peierls-Nabarro (courbes continues).*

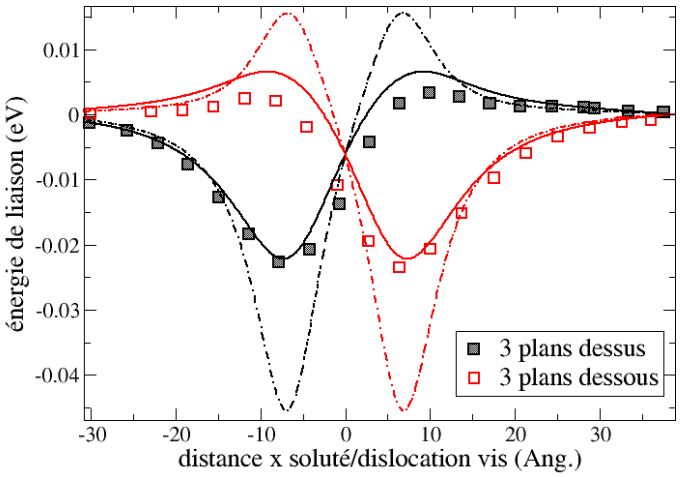


FIGURE 3.5 – *Même graphique que 3.4 pour une dislocation vis.*

Nous simulons cette interaction en appliquant une contrainte suffisante pour faire glisser la dislocation librement dans le cristal contenant l'atome de soluté. Au cours du glissement de la dislocation, nous enregistrons l'énergie potentielle du système en fonction de la position de la dis-

location. Suivant Proville et al. (2006), ces simulations sont réalisées avec un algorithme de relaxation différent de l'algorithme de trempe rapide utilisé jusqu'à présent. En effet, nous ne voulons pas obtenir la configuration atomique la plus stable avec le moins de temps de calcul possible mais au contraire décrire le paysage énergétique rencontré par la dislocation pendant la relaxation. Pour ce faire, nous mettons en œuvre des simulations statiques basées sur un algorithme de Langevin sur-amorti. Cet algorithme correspond à la résolution de la dynamique newtonienne classique des atomes pour laquelle le terme d'inertie disparaît avec en plus l'ajout d'un frottement visqueux. La dynamique d'un atome de vitesse V s'écrit :

$$\lambda \vec{V}(t) = \vec{F}(t), \tag{3.3}$$

où F est la somme des forces sur l'atome considéré. Le frottement λ est choisi de manière à ce qu'il soit très grand devant le travail de la contrainte appliquée. Typiquement, pour une dynamique utilisant un pas de temps de 10 femto-secondes nous utilisons $\lambda = 4.10^2 eV.fs.\text{Å}^{-2}$. Grâce à cette méthode, nous échantillonnons au cours du glissement quasi-statique de la dislocation l'énergie interne U comme la somme de toutes les énergies potentielles des atomes. Cette énergie interne $U(x)$ est tracée en fonction de la position de la dislocation x sur les graphiques 3.4 et 3.5 pour les dislocations coin et vis respectivement.

La distance minimum entre le soluté et le cœur de la dislocation est d'environ ± 5 Å, correspondant à deux fois et demie la distance entre plans dans la direction $(1\bar{1}1)$. Les pics attractifs et répulsifs sont clairement associés à la position des dislocations partielles et par conséquent aux zones de compression et de tension, les atomes d'Al dilatant la matrice de Ni. Dans le cas d'une dislocation vis, il est intéressant de remarquer que l'énergie de liaison provient pour une large part de l'effet de taille avec une alternance des zones en compression et en tension pour chaque dislocation partielle. Les segments vis, même à cette échelle, pourront donc également participer au phénomène de vieillissement ou de DSS contrairement à une vision classique (Kuo 1977).

En prenant en compte à la fois les effets de taille et de module à partir des équations 3.1 et 3.2, les conditions aux limites ainsi que la dissociation de la dislocation, nous avons calculé l'énergie d'interaction entre une dislocation et un soluté via la théorie élastique. Afin de fournir la description la plus quantitative possible, nous utilisons la distance de dissociation et les vecteurs de Burgers effectifs des dislocations partielles calculés dans le chapitre 2. Dans un premier temps, le calcul des champs de contraintes intervenant dans les équations 3.1 et 3.2 est réalisé par l'intermédiaire de la modélisation classique d'une dislocation de type Volterra. Les prédictions du modèle élastique (traits pointillés discontinus des figures 3.4 et 3.5) montrent un accord qualitatif avec les calculs atomistiques. Nous reproduisons bien les pics associés à chaque dislocation partielle mais nous surestimons l'énergie d'interaction lorsque le soluté se trouve juste au-dessus ou juste au-dessous de la dislocation partielle. Nous avons également utilisé un champ de contrainte calculé à partir de la théorie linéaire anisotrope des dislocations (Steeds et Willis 1979) en

utilisant le formalisme sextique présenté par Hirth et Lothe (1982). La prise en compte du champ anisotrope des dislocations ajoute simplement une dépendance angulaire dans l'interaction dislocation-soluté et ne corrige pas significativement les résultats précédents (non-présentés ici).

Comme nous l'avons vu dans le chapitre 2, le cœur de chaque dislocation partielle est loin d'être compact et s'étale dans le plan de glissement. Nous avons cherché à améliorer la modélisation de l'interaction dislocation-soluté par la prise en compte de l'étalement du cœur des partielles en calculant cette fois le champ de contrainte à partir d'une dislocation de type P-N (Hirth et Lothe 1982). Le principe d'utiliser un champ non-singulier plus réaliste pour calculer l'énergie de liaison dislocation-soluté a déjà été mis en œuvre par Suzuki (1957) et Barnett et al. (1982). D'autres champs élastiques non-singuliers ont été développés dans la littérature comme celui proposé par Cai et al. (2006) mais, contrairement au champ de P-N, étalé dans le plan de glissement, ils décrivent un étalement isotrope du cœur de la dislocation. Nous utilisons l'étalement du cœur des dislocations partielles calculé dans le chapitre précédent. Les résultats de cette modélisation sont reportés sur les graphiques 3.4 et 3.5 montrant un meilleur accord avec les résultats atomistiques. Le fait de prendre en compte l'étalement des cœurs des dislocations partielles retire la singularité du champ de contrainte et lisse l'interaction dislocation-soluté. Notons que loin des dislocations partielles, le champ élastique de P-N converge vers celui de Volterra. De même pour un soluté situé sur un plan très éloigné du plan de glissement ($\gtrsim 60$ plans), le champ de P-N converge vers le champ de Volterra.

Même avec un champ non-singulier de type P-N, notre description théorique n'est pas quantitative et il existe des termes que nous n'avons pas pris en compte. Le premier d'entre eux est l'effet Suzuki précédemment décrit. L'atome de soluté peut interagir avec le champ élastique généré par la faute d'empilement (Henager et Hoagland 2005). Sur les figures 3.4 et 3.5, nous remarquons que notre modélisation surestime légèrement l'énergie d'interaction dislocation-soluté particulièrement au milieu des dislocations partielles c'est-à-dire au niveau de la faute d'empilement. D'autre part, nous n'avons pas pris en compte les termes de dilatations créés par les effets non-linéaires du cœur des dislocations (Seeger et Bross 1956, Henager et Hoagland 2004, Clouet et al. 2009). Enfin un dernier effet, présent dans nos simulations mais absent de notre modélisation, est le changement de la géométrie des cœurs de dislocation lors de l'interaction avec le soluté (Doukhan et Saada 1972). Au regard de la comparaison avec les résultats atomistiques, ces effets semblent toutefois du second ordre par rapport aux effets de taille et de module pour une distance supérieure ou égale à trois plans de glissement. En revanche, au voisinage des cœurs de dislocation, sièges de grande déformation, la théorie linéaire élastique dévie logiquement des simulations atomistiques. Pour étudier l'interaction dislocation-soluté, il s'avère alors nécessaire d'utiliser les simulations atomistiques.

3.2 Force d'ancrage d'un obstacle

3.2.1 Calcul de la force d'ancrage

Nous nous intéressons aux solutés situés dans les plans contigus au plan de glissement, là où l'ancrage des dislocations est piloté par leur interaction avec le cœur des dislocations. La force d'ancrage maximale f_m d'un soluté placé dans un des plans contigus au plan de glissement est un paramètre important car il entre dans la formulation de tous les modèles analytiques de DSS que nous voulons tester. Pour calculer précisément la force d'ancrage d'un obstacle, nous ne pouvons pas utiliser la dérivée du paysage énergétique calculée dans la section précédente pour un soluté situé à trois plans cristallins du plan de glissement. En effet pour un obstacle au voisinage du cœur, les dislocations partielles se courbent légèrement lors de l'interaction avec l'obstacle et l'énergie interne du système comprend un terme de tension de ligne. Comme cette courbure est faible, le calcul de la force est très sensible à la description de l'énergie de ligne. Une décomposition entre l'énergie d'interaction dislocation-soluté et l'énergie provenant de la tension ligne est alors plus difficile que dans le cas d'obstacles forts comme les cavités (Monnet 2007).

Afin de calculer la force d'ancrage des solutés de la manière la plus précise possible, nous utilisons une méthode directe développée par Proville et al. (2006). Elle consiste à calculer à l'aide de simulations statiques la contrainte critique τ_c nécessaire pour décrocher la dislocation d'un obstacle. Nous utilisons la même procédure que celle utilisée pour le calcul de la contrainte de Peierls τ_p . Nous imposons une contrainte τ_{app} suivie d'une relaxation de l'enthalpie du système. Au cours de la relaxation, la dislocation atteint une position stable ou commence à glisser. τ_c est la contrainte correspondant au franchissement de l'obstacle par la dislocation pour laquelle il n'existe plus de position stable.
Dans notre système de simulation, l'ajout d'un seul atome de soluté crée une chaîne régulièrement espacée d'obstacles du fait des conditions périodiques dans la direction de la ligne de la dislocation. L'espacement entre obstacles est égal à la taille de la boîte de simulation L_y dans la direction de la ligne de la dislocation comme schématisé sur la figure 3.6. La force de Peach-Kohler exercée sur la dislocation via la contrainte appliquée τ_{app} est une force par unité de longueur. En faisant varier la distance inter-obstacle L_y et en mesurant τ_c nous pouvons donc remonter à la force de l'obstacle f_m. L'équilibre d'une dislocation de longueur L_y poussée à la contrainte critique τ_c sur un obstacle de force maximale f_m s'écrit :

$$\tau_c b L_y = f_m + \tau_p b L_y, \tag{3.4}$$

avec b le vecteur de Burgers de la dislocation et τ_p la contrainte de Peierls s'opposant au mouvement de la dislocation. Une manière classique de représenter la force d'un obstacle consiste à la normaliser par μb^2 nous donnant le coefficient d'accrochage caractéristique $\alpha = f_m/\mu b^2$. Si la tension de ligne de la dislocation était égale à son estimation classique $\Gamma_0 = 0.5\mu b^2$ (Nabarro 1967), l'angle pris par la dislocation à la contrainte critique serait alors égal à α comme schématisé sur la figure 3.6. En introduisant α dans

l'équation 3.4 et en passant L_y au deuxième membre, nous obtenons une relation entre la contrainte critique et la longueur de la dislocation :

$$\frac{\tau_c}{\mu} = \alpha \frac{b}{L_y} + \frac{\tau_p}{\mu}. \tag{3.5}$$

Cette relation est linéaire entre la contrainte critique et l'inverse de la distance inter-obstacle. Nous pouvons donc déduire le coefficient d'accrochage α du calcul de τ_c pour plusieurs L_y. Cette relation linéaire est valide même pour les dislocations dissociées comme l'ont montré Hardikar et al. (2001).

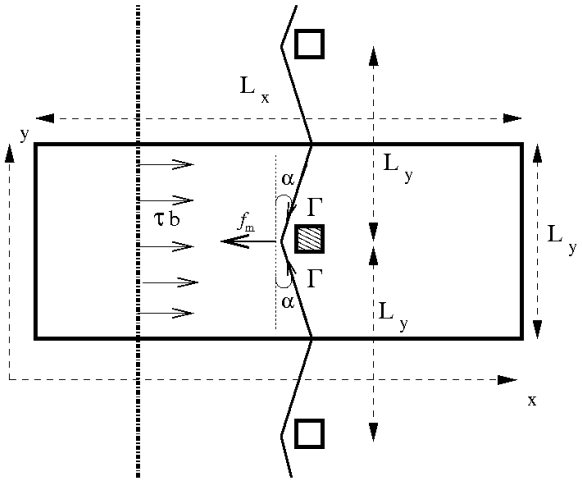


FIGURE 3.6 – *Schéma d'une dislocation dissociée ancrée par l'interaction de sa dislocation partielle de tête sur un atome de soluté. La dislocation est poussée contre l'obstacle par la contrainte appliquée au système. Une chaîne régulière d'obstacles est générée par les conditions aux limites périodiques le long de la ligne de dislocation.*

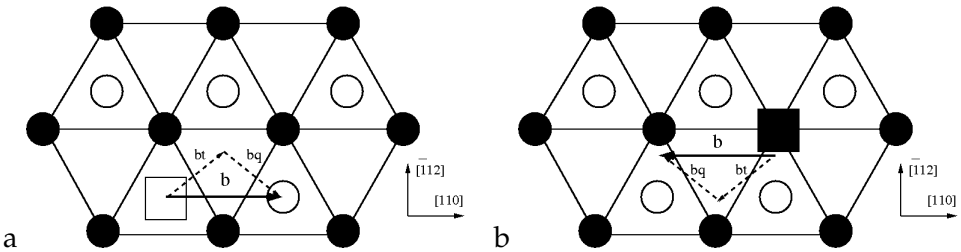


FIGURE 3.7 – *Portion des deux plans* $(1\bar{1}1)$ *qui bornent le plan de glissement des dislocations. Les symboles ouverts représentent les atomes situés au-dessus du plan de glissement et les symboles pleins les atomes situés en dessous du plan de glissement. Les symboles circulaires sont les atomes de la matrice. Les vecteurs correspondent au glissement des plans les uns par rapport aux autres lors du passage d'une dislocation coin. Un atome de soluté (symbole carré) est situé soit au-dessus (a) soit au-dessous (b) du plan de glissement.*

Nous réalisons le calcul des coefficients d'ancrage pour un atome de soluté situé sur le plan soit au-dessus soit au-dessous du plan de glissement pour les dislocations coin et vis dans les deux alliages modèles. Une dislocation est ancrée deux fois par un soluté au cours de son glissement. En effet, l'obstacle interagit avec ses deux dislocations partielles l'une après l'autre. L'atome de soluté est franchi en premier par la dislocation partielle de tête puis par la dislocation partielle de queue. Nous calculons

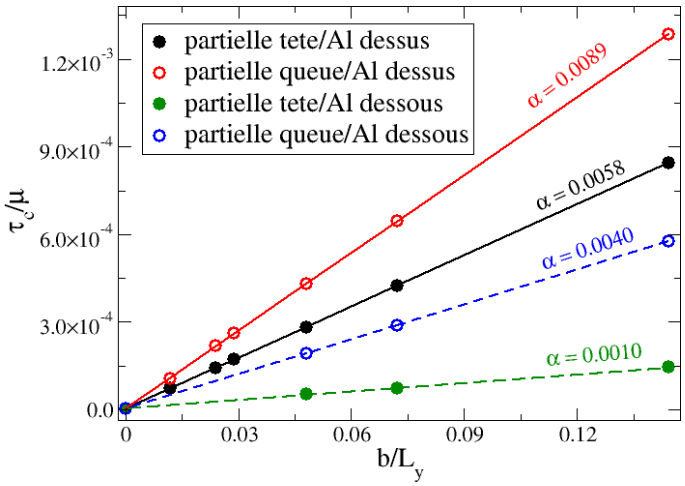


FIGURE 3.8 – *Contrainte critique statique normalisée en fonction de l'inverse de la distance inter-obstacles normalisée. Les symboles correspondent aux résultats de simulation de franchissement d'un atome de soluté d'aluminium par une dislocation coin dans le nickel. Les pentes des ajustements linéaires déterminent le coefficient d'accrochage d'un atome de soluté pour les dislocations partielles de tête (symboles pleins) et de queue (symboles ouverts). L'atome de soluté est situé dans un plan contigu au plan de glissement au-dessus (traits continus) ou en dessous (traits discontinus) de ce plan.*

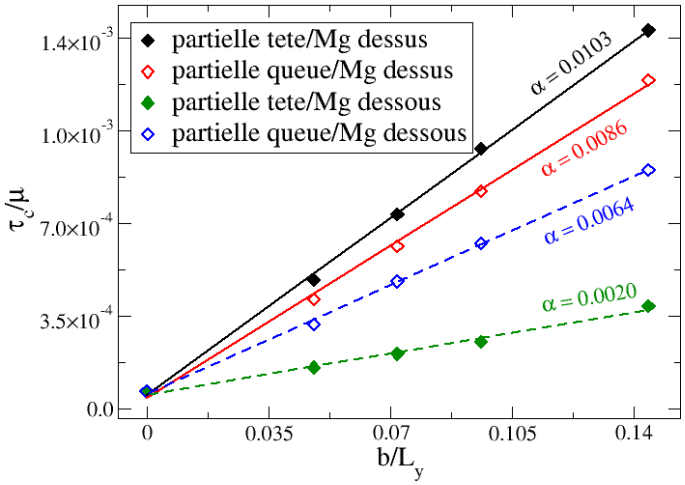


FIGURE 3.9 – *Même graphique que 3.8 pour une dislocation coin franchissant un atome de magnésium dans l'aluminium.*

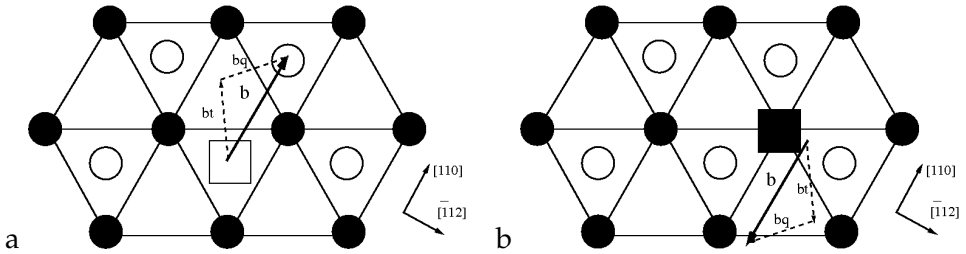


FIGURE 3.10 – *Même graphique que 3.7 pour une dislocation vis franchissant un atome de soluté situé au-dessus (a) et au-dessous (b) du plan de glissement.*

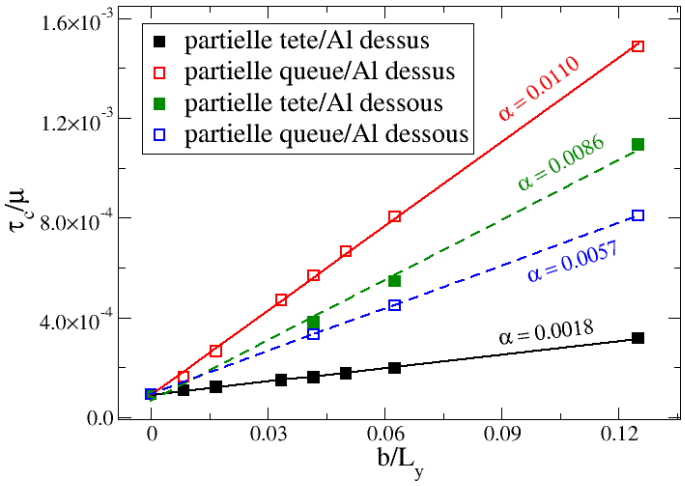


FIGURE 3.11 – *Même graphique que 3.8 pour une dislocation vis franchissant un atome d'aluminium dans le nickel.*

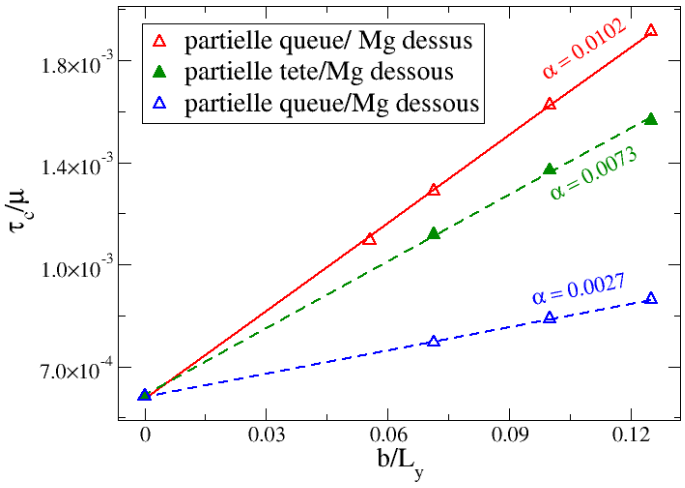


FIGURE 3.12 – *Même graphique que 3.8 pour une dislocation vis franchissant un atome de magnésium dans l'aluminium.*

ainsi pour une même configuration d'obstacles deux contraintes critiques. Pour décrire de façon systématique les forces d'obstacle d'un atome de soluté isolé, nous devons déterminer en tout 16 coefficients d'ancrage. Les réactions entre dislocation et soluté isolé situés au-dessus ou au-dessous du plan de glissement sont résumées sur les schémas 3.7 et 3.10 respectivement pour les dislocations coin et vis.
Les résultats des calculs des contraintes critiques en fonction de la taille du système dans la direction de la ligne de dislocation sont reportés sur les graphiques 3.8, 3.9, 3.11 et 3.12 pour les différentes dislocations partielles des dislocations coin et vis dans les deux alliages. L'ordonnée à l'origine de ces graphiques correspond à la contrainte de Peierls normalisée τ_p/μ calculée dans le chapitre 2. Nous observons bien une dépendance linéaire de τ_c avec $1/L_y$ dont la pente fournie par une régression linéaire détermine le coefficient d'ancrage α. Les atomes de soluté isolés dans les plans contigus au plan de glissement possèdent un coefficient maximum d'ancrage égal à $\alpha = 0,0110$. Ils sont donc des obstacles faibles en comparaison des jonctions de dislocation de type Lomer-Cottrell ($\alpha \approx 0,8$) ou des boucles d'interstitiels ($\alpha \approx 0,15$) (Rodney 1999). Lors de l'interaction avec les atomes de soluté, les dislocations se courbent peu et il n'est pas nécessaire de prendre en compte l'interaction entre les segments courbés de la dislocation, contrairement aux cas d'obstacles plus forts comme des précipités (Bacon et al. 1973).

Il est intéressant de noter que les forces d'obstacle des dislocations vis sont du même ordre de grandeur que celle des dislocations coin pour les deux types d'alliages de Ni(Al) et Al(Mg). Nous devrons donc étudier également le rôle des segments vis dans le DSS. Nous constatons de plus que les forces d'obstacles situés dans le plan de glissement sont loin d'être décrites par un unique paramètre, contrairement à ce qui est utilisé dans les théories analytiques du DSS. Ces forces sont fonction de la position du soluté et du type de dislocation partielle avec lequel il interagit.

3.2.2 Influence de la position du soluté sur la force d'ancrage

Pour une dislocation parfaite et un alliage donné, les forces d'ancrage f_m des atomes de soluté situés dans les plans contigus au plan de glissement sont multiples. Ces forces varient en fonction de la position du soluté et de la dislocation partielle avec laquelle il interagit. Deux mécanismes peuvent être invoqués pour expliquer l'origine de cette variété des forces d'obstacle.

Le premier mécanisme provient de l'anharmonicité de l'interaction. En effet, nous étudions l'interaction non-linéaire des atomes de soluté avec les cœurs des dislocations partielles et contrairement à la théorie élastique linéaire, la densité d'énergie d'une zone en tension n'est pas égale à celle d'une zone en compression. Le schéma 3.13 représente les champs de pression provenant des parties coin des dislocations partielles. La dislocation coin possède un champ de compression au-dessus du plan de glissement et un champ de tension au-dessous du plan de glissement. Au contraire, les zones en tension et en compression s'alternent pour la

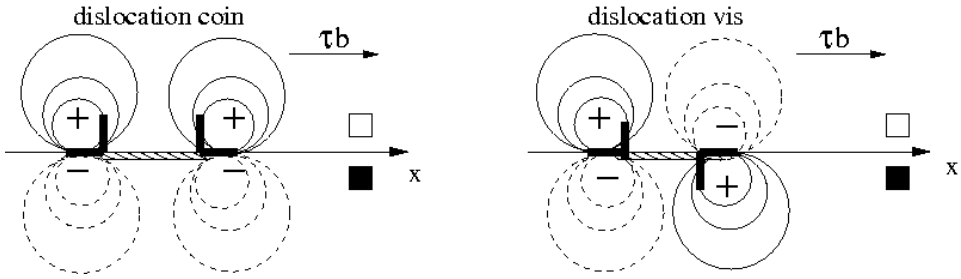


FIGURE 3.13 – *Schéma des champs de pression issus des parties coins d'une dislocation coin (gauche) et vis (droite) dissociées. Les solutés interagissent différemment avec la faute d'empilement et chaque dislocation partielle selon leur position au-dessus (symbole ouvert) ou au-dessous (symbole plein) du plan de glissement.*

dislocation vis dissociée. Au cours du glissement de la dislocation, un soluté traverse ces zones et ancre plus fortement les parties en compression des dislocations. Ainsi les coefficients d'ancrages calculés à partir des graphiques 3.8, 3.9, 3.11 et 3.12 sont, pour une dislocation partielle et un alliage donnés, systématiquement plus grands dans les zones en compression que dans les zones en tension. Par exemple, pour une dislocation coin (vis) l'ancrage de la partielle de tête est plus (moins) grand pour un atome de soluté situé au-dessus du plan de glissement que celui d'un atome situé au-dessous.

Pour comparer les dislocations partielles de tête et les dislocations partielles de queue, il est nécessaire de prendre en compte le deuxième mécanisme provenant de l'effet Suzuki. Étant donné que nous nous intéressons aux atomes de soluté situés dans les plans contigus aux plans de glissement, ces derniers visitent le ruban de faute d'empilement au cours du glissement de la dislocation. Or, comme nous l'avons étudié précédemment, les atomes de soluté des deux alliages sont plus stables dans la faute d'empilement. D'après le schéma 3.13, un soluté interagissant avec une dislocation partielle de tête entre dans la faute d'empilement, ce qui diminue l'énergie potentielle et donc la force d'obstacle. Inversement, le franchissement de la dislocation partielle de queue fait sortir le soluté de la faute d'empilement ce qui a pour conséquence d'ancrer plus fortement la dislocation. Ainsi pour deux champs de pression équivalents, la dislocation partielle de queue possède une force d'obstacle plus importante. L'effet Suzuki est plus important dans Ni(Al). Dans Al(Mg) il est faible à cause d'une énergie de ségrégation du soluté dans la faute d'empilement moins importante et de la plus petite distance de dissociation entre dislocations partielles. Comparer les forces opposées aux dislocations partielles de tête et de queue est plus délicat dans Al(Mg) car il existe un couplage des dislocations partielles plus important et une superposition de l'interaction avec chacune d'entre elle. C'est ce qui explique que la force d'ancrage soit nulle dans le cas d'un atome de Mg situé au-dessus du plan de glissement interagissant avec la partielle de tête pour la dislocation vis dans l'Al. Dans ce cas particulier, le soluté attire la partielle de tête dans une zone en tension et, du fait de la faiblesse de la dissociation, interagit directement avec la partielle de queue. Nous ne pouvons plus calculer alors de force d'ancrage pour la dislocation partielle de tête.

3.2.3 Influence de la distance entre soluté et plan de glissement sur la force d'ancrage

Nous répétons les simulations décrites dans la section précédente mais avec cette fois des solutés éloignés du plan de glissement afin de quantifier l'importance des interactions à longue portée par rapport à celles situées au voisinage du cœur des dislocations. Nous choisissons ici d'exprimer l'intensité de l'ancrage par la force f_m plutôt que par le coefficient d'accrochage α pour pouvoir comparer les deux alliages entre eux. Les résultats des calculs des forces d'ancrage en fonction de la distance par rapport au plan de glissement sont reportés sur les figures 3.14 et 3.15 respectivement pour les dislocations coin et vis.

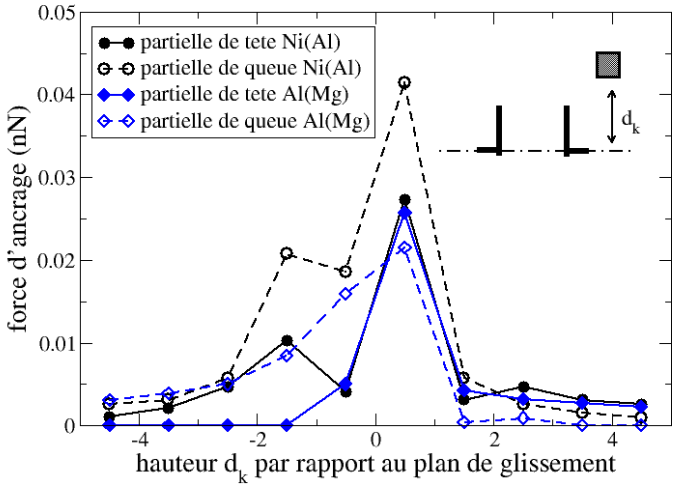


FIGURE 3.14 – *Forces d'ancrage d'un soluté situé sur le plan d_k par rapport au plan de glissement d'une dislocation coin pour les deux types d'alliages Ni(Al) et Al(Mg). Les symboles pleins correspondent aux dislocations partielles de tête et les symboles ouverts aux dislocations partielles de queue.*

En accord avec la théorie élastique, nous observons une décroissance rapide de la force d'obstacle avec l'éloignement de l'atome de soluté du plan de glissement. Nous confirmons la description de Fleischer et Hibbard (1963) pour lesquels les forces d'obstacle les plus importantes se rencontrent pour des solutés situés dans le plan de glissement. Les figures 3.14 et 3.15 montrent que les forces d'obstacle sont globalement plus importantes dans l'alliage de Ni(Al) particulièrement dans les zones voisines des cœurs de dislocations. Il est intéressant de noter qu'à cette échelle, du fait de la dissociation, la portée des dislocations vis n'est pas nulle et une force d'obstacle non-négligeable persiste pour un soluté placé à cinq plans cristallins du plan de glissement. Près du plan de glissement, la forme dissymétrique prise par les courbes 3.14 et 3.15 par rapport au plan de glissement est due à l'effet d'anharmonicité. Loin du cœur cette dissymétrie peut être imputée à la classification en terme de force d'obstacle provenant des dislocations partielles de tête et de queue. Pour des distances supérieures à plusieurs distances de dissociation, cette classifi-

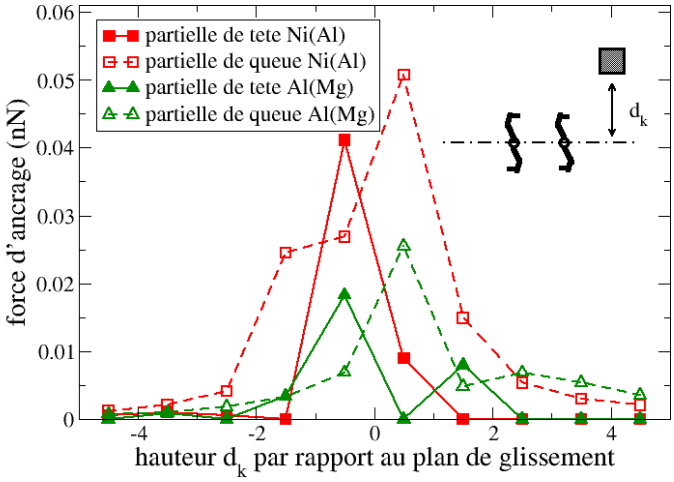


FIGURE 3.15 – *Même graphique que 3.14 pour une dislocation vis dans les deux types d'alliages Ni(Al) et Al(Mg).*

cation entre partielle de tête et de queue perd son sens et un atome de soluté ne perçoit plus qu'un champ de contrainte égal à la superposition des dislocations partielles.

3.2.4 Force d'ancrage des paires de solutés

Jusqu'à présent nous avons étudié les forces d'ancrage des atomes de soluté isolés. Or, dans une solution solide de quelques % atomiques les solutés ne sont plus isolés et forment fréquemment des clusters. D'autre part, afin d'expliquer le DSS mesuré dans les alliages de Cu(Ge) et Cu(Mn), Wille et al. (1987) émettent l'hypothèse d'obstacles effectifs au mouvement des dislocations constitués par des doublets ou des triplets d'atomes de soluté. Butt et Feltham (1980) invoquent également le rôle joué par des amas de solutés dans leur description du DSS. Pour tendre vers la description des obstacles présents dans une solution solide, il apparaît donc nécessaire d'étudier également les obstacles constitués par plusieurs atomes de soluté.

Dans le cas d'un cluster de solutés, deux mécanismes d'ancrage peuvent s'ajouter aux effets de taille, de module et à l'effet Suzuki qui ont été décrits pour un soluté isolé dans la section 3.1. Ces mécanismes sont liés aux effets de quadraticité et d'ordre chimique. Dans le premier mécanisme, le champ élastique associé à un cluster de solutés ne possède plus une symétrie sphérique contrairement à un soluté substitutionnel isolé. L'obstacle interagit alors également avec les champs de contrainte en cisaillement de la dislocation, pouvant provoquer un ancrage supplémentaire. Par exemple, l'effet de quadraticité a été décrit en théorie élastique pour un interstitiel de C dans le Fe par Clouet et al. (2008) et pour un auto-interstitiel dans le Ni par Liu et al. (2008).
Dans le deuxième mécanisme d'ordre chimique, c'est le changement de configuration des atomes de soluté au passage de la dislocation qui im-

plique un changement énergétique (Fisher 1954). En effet, une dislocation cisaillant un cluster décale d'un vecteur de Burgers les solutés de part et d'autre du plan de glissement, ce qui peut amener les solutés dans une configuration plus ou moins stable. C'est le cas des alliages possédant un ordre à courte distance (ou SRO pour Short Range Order en anglais) important comme Ni(Al). Expérimentalement Adorno et al. (2006) montrent qu'au cours du vieillissement, à une température supérieure à la température de précipitation, la résistivité et la micro-dureté d'une solution solide de Ni-4,49%Al augmentent. Ils attribuent cette augmentation au SRO. De même Jouiad et al. (1999) expliquent la déformation plastique dans la phase γ de Superalliages à base Ni sous forme d'empilement de dislocation par la présence de SRO créant un ancrage supplémentaire. Les potentiels interatomiques que nous utilisons simulent deux alliages dont les effets d'ordre sont très différents. Pour l'alliage de Ni(Al) un fort effet d'ordre est présent alors qu'inversement pour Al(Mg) cet effet est absent (cf. section A.2 page 178). Au niveau du diagramme de phase de Ni(Al), l'effet d'ordre chimique se traduit par la présence d'une phase ordonnée $L1_1$. Nous pouvons donc tester l'hypothèse d'un durcissement supplémentaire apporté par l'effet chimique en comparant les forces d'obstacle de cluster des deux alliages.

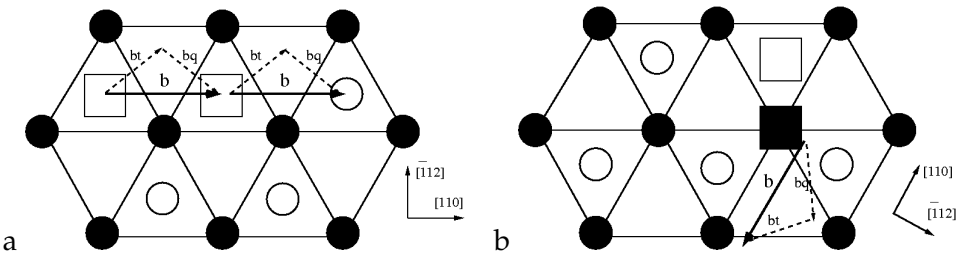


FIGURE 3.16 – *Même graphique que 3.7 pour deux exemples de configurations de paire de solutés. (a) Une dislocation coin franchissant une paire premiers voisins (type II) non-croisante. (b) Une dislocation vis franchissant une paire premiers voisins (type II) croisante. Dans ce cas, le fait que les solutés soient situés de part et d'autre du plan de glissement change leur distance au cours du passage de la dislocation.*

Toutefois, il n'est techniquement pas possible d'étudier tous les types de clusters de solutés. En effet le nombre de configurations à étudier croît exponentiellement avec le nombre d'atomes composant un cluster de solutés. Afin de tester l'effet des clusters de solutés et d'être en mesure de calculer les forces d'obstacles sur un nombre raisonnable de configurations, nous nous restreignons aux clusters formés par les paires d'atomes de soluté. Les paires présentent les deux effets de quadraticité et d'ordre chimique. D'un point de vue théorique, les paires de solutés ont été étudiées par Proville et al. (2006) dans l'alliage de Ni(Al) pour tenter d'expliquer la dépendance linéaire de la contrainte d'écoulement avec la concentration en soluté.

Les forces d'ancrage des paires de solutés sont calculées avec la même procédure que celle utilisée pour les atomes de soluté isolés. Nous classifions les obstacles en fonction de la distance inter-soluté en commençant par convention avec les obstacles formés par un soluté isolé et notés type I. Nous calculons systématiquement les forces d'ancrage des paires de

solutés premiers (type II) et seconds (type III) voisins dont les solutés sont placés sur les plans contigus au plan de glissement. Nous calculons également les forces d'ancrage pour certaines configurations de paires de solutés troisièmes voisins (type IV). Outre la distance entre les solutés, nous observons que les paires de solutés peuvent être classées par rapport à leurs réactions avec la dislocation comme il a été reporté sur le schéma 3.16. Par exemple, un dimère dont les atomes de soluté sont placés de part et d'autre du plan de glissement, change de distance inter-soluté au cours du glissement de la dislocation. Ces paires dont les atomes de soluté sont rapprochés ou éloignés d'un vecteur de Burgers au passage de la dislocation sont nommées paires croisantes. En revanche, une paire de soluté dont les atomes sont placés du même côté du plan de glissement ne change pas de configuration lors du passage de la dislocation. Ces paires sont nommées paires non-croisantes. En comptabilisant l'interaction avec chaque dislocation partielle, les caractères coin et vis des dislocations ainsi que les deux types d'alliages, nous avons étudié en tout 116 configurations de paires. Les paramètres et les géométries des dimères étudiés sont reportés dans les annexes (cf. section B.2 192).

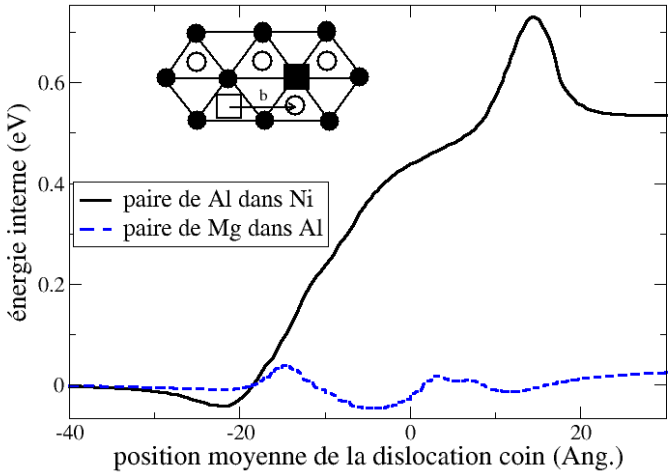


FIGURE 3.17 – *Énergie potentielle interne en fonction de la position moyenne d'une dislocation coin cisaillant une paire de solutés dans les deux types d'alliages Ni(Al) et Al(Mg). Le schéma montre la trajectoire effectuée par la paire de solutés au cours du processus de cisaillement ramenant la paire de seconds à premiers voisins.*

Deux exemples du potentiel énergétique rencontré par une dislocation lors du cisaillement d'une paire croisante sont présentés sur les graphiques 3.17 et 3.18, respectivement pour une dislocation coin et vis. Nous comparons sur ces graphiques les deux alliages pour la même configuration de paire dont les atomes de soluté passent d'une position de seconds à premiers voisins au cours du glissement de la dislocation. Ce glissement est très défavorable énergétiquement dans Ni(Al) eu égard à sa structure ordonnée $L1_2$ où les solutés sont stables dans une position de seconds voisins. Dans le cas de l'alliage Al(Mg), l'énergie de configuration engendrée au passage de la dislocation est relativement

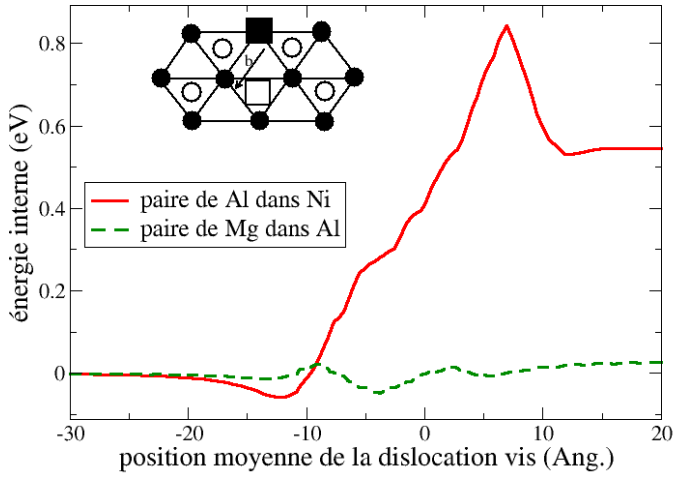


FIGURE 3.18 – *Même graphique que 3.17 pour une dislocation vis dans les deux types d'alliages Ni(Al) et Al(Mg).*

faible. Malgré une énergie de configuration pouvant être très importante comme celle des graphiques 3.17 et 3.18, les coefficients d'ancrage des paires croisantes de l'alliage de Ni(Al) ne sont pas significativement plus importantes que les paires non-croisantes. Ces configurations de paire peuvent même correspondre à des forces d'ancrage plus faibles lorsque le cisaillement de la dislocation induit un passage dans des positions plus stables. Plutôt qu'un accroissement des forces d'obstacles, nous observons une dispersion des forces d'ancrage due à l'effet chimique de ces dimères. Les forces d'ancrages les plus importantes sont rencontrées dans les deux alliages pour des paires de soluté non-croisantes situées dans les parties en compression. Le résultat s'explique par l'effet d'anharmonicité décrit précédemment pour les atomes de soluté isolés.

Afin de rationaliser l'effet des paires de solutés, nous comparons les coefficients d'accrochage des dimères avec ceux des atomes de solutés isolés. Pour cela, nous comparons le coefficient d'accrochage moyen d'un type de paire avec la composition linéaire du coefficient d'accrochage des atomes de soluté isolés constituant la paire considérée. Par exemple, l'ancrage moyen des paires d'atomes de solutés premiers voisins situés au-dessus du plan de glissement est comparé avec la somme de deux coefficients d'accrochage d'un soluté isolé situé au-dessus du plan de glissement. Pour chaque dislocation partielle dans les deux alliages et pour les dislocations coin et vis nous calculons :

$$\begin{aligned}
\bar{\alpha}^{II}_{\text{paire non-croisante au-dessus}} &= 2\alpha^{I}_{\text{soluté isolé au-dessus}} \\
\bar{\alpha}^{II}_{\text{paire non-croisante au-dessous}} &= 2\alpha^{I}_{\text{soluté isolé au-dessous}} \\
\bar{\alpha}^{II,III,IV}_{\text{paire croisante}} &= \alpha^{I}_{\text{soluté isolé au-dessus}} + \alpha^{I}_{\text{soluté isolé au-dessous}}.
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Les résultats de cette comparaison sont reportés sur la figure 3.19. Nous observons une bonne corrélation entre les coefficients d'ancrage moyens des paires et leur description en terme de combinaison linéaire de soluté

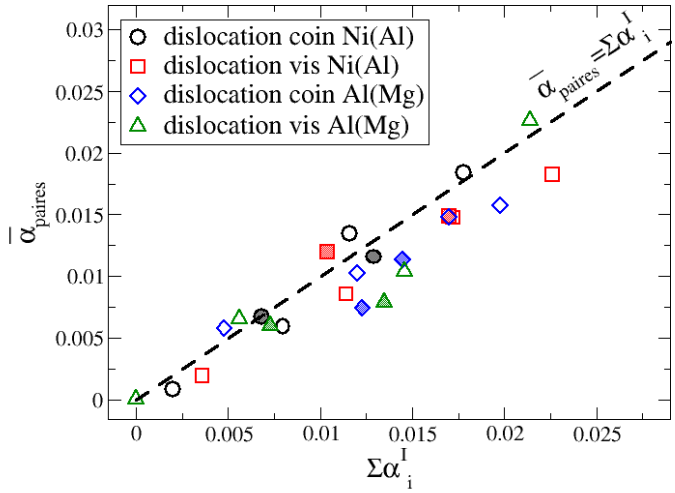


FIGURE 3.19 – *Moyenne du coefficient d'accrochage par type de dimère (cf. tableaux B.1 et B.2 page 194) en fonction de la combinaison linéaire des coefficients d'accrochage de solutés isolés dont la superposition correspond aux dimères. Les deux types d'alliages Ni(Al) et Al(Mg) sont reportés pour des paires de solutés croisant le plan de glissement (symboles pleins) et ne croisant pas le plan de glissement (symboles ouverts). La ligne discontinue représente le cas idéalisé où les paires de soluté auraient pour force d'ancrage exactement le résultat de la superposition des forces d'ancrage des atomes de solutés qui composent la paire.*

isolé. Les paires de solutés possèdent donc en moyenne une force d'ancrage correspondant à la superposition linéaire de celle des solutés isolés. Les mêmes conclusions que dans le cas des solutés isolés concernant les effets anharmoniques et l'effet Suzuki sont reconduites pour l'ancrage des dislocations par les dimères. Ce résultat est toutefois à considérer avec précaution car il s'agit d'obstacles dans le plan de glissement et donc d'une interaction non-linéaire avec la dislocation. De plus, nous ne considérons ici que des paires d'atomes de soluté et l'interaction avec une dislocation peut devenir différente pour un cluster de solutés composé de plus de deux atomes de soluté.

3.3 Portée d'interaction de l'ancrage

3.3.1 Calcul de la portée

Le dernier paramètre entrant dans la formulation des théories du DSS est la portée d'interaction des obstacles dans le plan de glissement w. Il n'est pas possible ici d'utiliser la théorie élastique du fait de la non-linéarité de l'interaction entre les cœurs des dislocations partielles et les solutés. Afin d'estimer w nous faisons interagir une dislocation avec les obstacles situés dans le plan de glissement en calculant le paysage d'énergie potentielle rencontré par la dislocation au cours de son glissement. La contrainte appliquée correspond à la contrainte critique de franchissement des obstacles de sorte que la dislocation glisse librement dans le cristal. Nous utilisons la méthode de simulation statique de type Langevin

sur-amorti décrite précédemment. Lors de sa dynamique de Langevin, la dislocation glisse et croise l'obstacle et nous calculons l'énergie potentielle en fonction de la position de la dislocation. À titre d'exemple, le paysage d 'énergie obtenu pour un atome d'Al situé dans le plan au-dessus du plan de glissement interagissant avec une dislocation coin dans le Ni est reporté sur la figure 3.20.

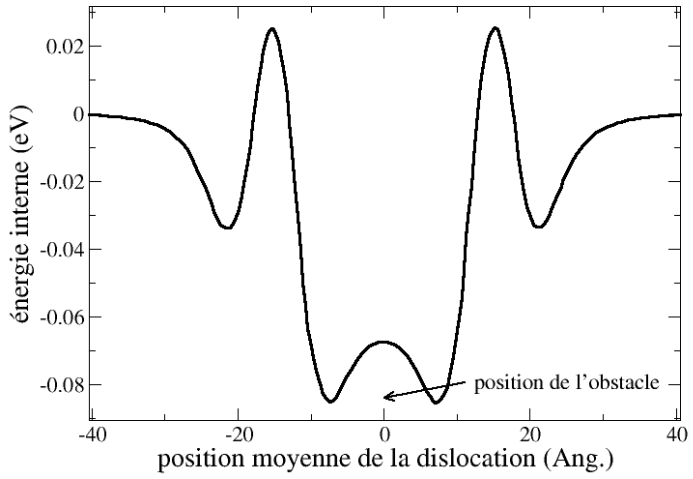


FIGURE 3.20 – *Énergie potentielle interne en fonction de la position moyenne d'une dislocation coin dans le nickel franchissant un atome d'aluminium situé dans le plan au-dessus du plan de glissement. L'obstacle correspond à la figure 3.7.*

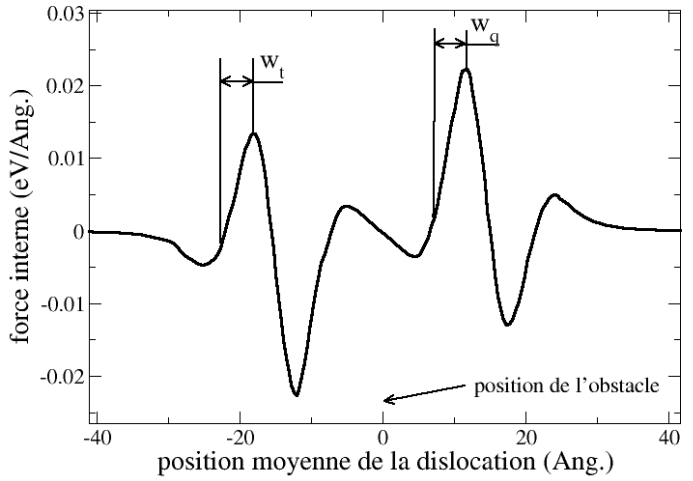


FIGURE 3.21 – *Exemple de calcul de la portée d'interaction dislocation-soluté w. La force interne (dérivée de la figure 3.20) est reportée en fonction de la position moyenne d'une dislocation coin dans le nickel franchissant un atome d'aluminium situé dans le plan au-dessus du plan de glissement. Les indices « t » et « q » correspondent respectivement à la portée d'interaction de la dislocation partielle de tête et de queue.*

Dans cette figure, nous distinguons clairement l'interaction de l'obstacle avec les deux dislocations partielles de tête et de queue ainsi qu'en leur milieu l'interaction avec le ruban de faute d'empilement. Ce potentiel d'interaction se différencie nettement des potentiels classiques de type Cottrell et Bilby (1949) utilisés théoriquement pour décrire l'interaction dislocation-soluté. Encore une fois ce résultat nous montre la nécessité des simulations atomistiques dans la description de l'interaction soluté-cœur des dislocations. Il n'existe pas de définition univoque pour la portée d'interaction. Suivant les travaux de Proville et al. (2006), nous proposons un estimateur de w. Nous calculons la dérivée première du paysage d'énergie précédemment obtenu sur la figure 3.20 et obtenons l'équivalent d'une force interne s'exerçant sur la dislocation. Cette force est reportée sur le graphique 3.21. La portée d'interaction w est définie comme la distance entre la force maximale et la plus petite distance pour laquelle la force s'annule. Comme représenté sur la figure 3.21, nous calculons alors les portées d'interaction w_t et w_q respectivement pour les dislocations partielles de tête et de queue.

3.3.2 Origine physique de la portée d'interaction

Nous calculons les 132 portées w des configurations de solutés isolés et de paires de solutés avec la méthode décrite dans la section précédente. Les portées w et les coefficients d'ancrage α des obstacles étudiés sont reportés dans les annexes (cf. section B.2 page 192).

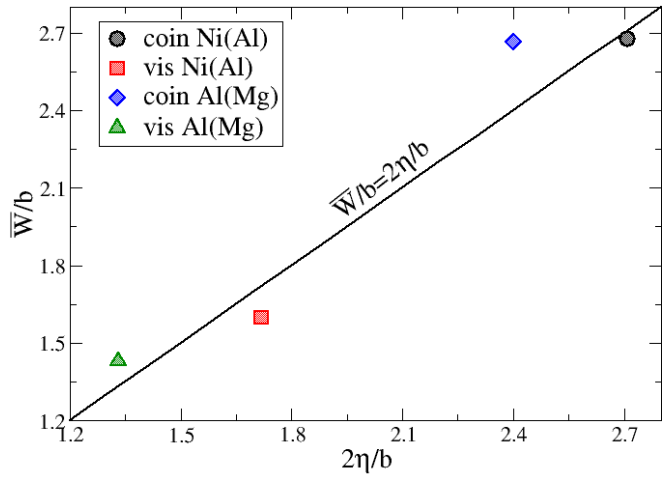


FIGURE 3.22 – *Portée d'interaction moyenne des obstacles $\overline{W}$ (cf. tableaux B.1 et B.2 194), en fonction de l'étalement des cœurs de dislocation 2η pour les deux types de dislocations ainsi que pour les deux types d'alliages simulés.*

Les portées d'interaction calculées sont loin de l'estimation classique de la littérature égale à b. Comme pour les coefficients d'accrochage α, nous observons un spectre des portées d'interaction w distribuées autour d'une valeur typique de $2b$. Cette distribution des portées d'interaction est

difficile à interpréter. Nous observons que la portée d'interaction des dislocations coin est en moyenne plus importante que celle des dislocations vis. De même, pour un même caractère de dislocation, elles semblent supérieures dans l'alliage de Ni(Al) par rapport à l'alliage d'Al(Mg). Afin de comprendre ces tendances, nous choisissons de raisonner en termes de moyenne des portées par type de dislocation. Nous calculons les portées moyennes $\overline{W}$ pour chaque type de dislocation dans les deux alliages modèles pour toutes les configurations d'obstacle étudiées. Nous définissons la moyenne des portées comme :

$$\overline{W} = \sum_{i=I,II,III,IV}^{n} \frac{w_i}{n}, \tag{3.7}$$

où la somme est realisée sur l'ensemble des obstacles. Étant donné que nous étudions l'interaction entre les dislocations et les obstacles situés autour du plan de glissement, nous choisissons de comparer les portées moyennes $\overline{W}$ avec les étalements des cœurs des dislocations 2η calculés dans le chapitre précédent. La figure 3.22 représente la comparaison entre ces deux quantités et montre une corrélation tout à fait satisfaisante. Le fait que cette corrélation soit observée pour les dislocations coin et vis dans les deux alliages nous permet de penser que l'étalement des cœurs des dislocations est un paramètre physique pertinent pour décrire les portées d'interaction dislocation-soluté dans le plan de glissement.

Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons identifié les origines de l'ancrage des dislocations par les atomes de soluté résidant essentiellement dans les effets de taille, de module et d'interaction avec le ruban de faute d'empilement. Nous avons décrit l'interaction statique entre dislocations et obstacles dans les alliages de Ni(Al) et Al(Mg) en fonction de la position des atomes de soluté.

Loin du plan de glissement, à des distances supérieures à la distance de dissociation, la théorie élastique peut modéliser l'interaction à condition de prendre en compte l'étalement des cœurs des dislocations partielles. L'interaction avec les solutés diminue rapidement avec leur éloignement du plan de glissement.
Dans les plans contigus au plan de glissement, nous avons déterminé la force et la portée d'interaction des obstacles constitués d'atomes de soluté isolés et de paires de solutés. Les effets anharmoniques et de ruban de faute d'empilement expliquent qualitativement les forces d'ancrage calculées dans l'interaction non-linéaire entre le cœur des dislocations partielles et les obstacles situés dans le plan de glissement. Nous observons que les dislocations vis possèdent des forces d'ancrage du même ordre de grandeur que celles des dislocations coin.
La comparaison des obstacles formés par un soluté unique avec les obstacles formés par des paires croisant le plan de glissement nous montre que l'effet d'ordre chimique est faible. Les forces d'ancrage des paires de soluté se comportent en moyenne comme la superposition des forces

provenant des solutés les constituant. Nous montrons également que la portée d'interaction peut être reliée à l'étalement des cœurs de dislocation dans le plan de glissement.

À ce stade, nous disposons de tous les paramètres d'entrée des modèles analytiques de DSS à température nulle. Avant d'étudier la contrainte d'écoulement d'une dislocation en solution solide, nous profitons de notre étude approfondie de l'interaction dislocation-soluté isolé pour nous pencher sur le comportement thermique du franchissement d'un atome de soluté par une dislocation.

4 Activation thermique du franchissement d'un atome de soluté par une dislocation

Sommaire

4.1 Temps d'attente de franchissement du soluté 99
4.1.1 Calcul du temps d'attente 99
4.1.2 Statistique du temps d'attente 101
4.2 Variation de l'enthalpie d'activation avec la contrainte 103
4.2.1 Variation du temps d'attente moyen en fonction de la température et de la contrainte appliquée 103
4.2.2 Calcul de l'enthalpie d'activation 105
4.2.3 Enthalpie d'activation déduite du paysage d'énergie interne 108
4.3 Propriétés dynamiques d'une dislocation en absence de soluté 110
4.3.1 Accélération d'une dislocation et calcul de sa masse effective 110
4.3.2 Vitesse stationnaire d'une dislocation et calcul du frottement effectif 112
4.4 Variation de la fréquence d'attaque avec la contrainte 115
4.4.1 Modèle de Friedel-Leibfried 116
4.4.2 Modèle de Granato 118
4.4.3 Modèle de Kramer unidimensionnel 118
Conclusion 120

Jusqu'à présent, nous avons réalisé des simulations statiques afin d'obtenir les états stables, les configurations critiques et les paysages énergétiques rencontrés par les dislocations interagissant avec un atome de soluté. Avant d'étudier le comportement d'une dislocation en solution solide, nous souhaitons décrire l'activation thermique du franchissement d'un atome de soluté par une dislocation caractérisant le DSS en température.

Pour cela, nous mettons en œuvre des simulations de dynamique moléculaire d'une dislocation poussée contre un atome de soluté à une contrainte inférieure à la contrainte critique statique et à une température constante (Tchoufag et al. 2009). Nous profitons de la relative simplicité du système dislocation-soluté isolé pour étudier la statistique des temps d'attente avant le franchissement de l'obstacle par la dislocation. Nous nous restreignons à l'étude de l'alliage de Ni(Al) étant donné le coût des calculs de dynamique moléculaire. Nous comparons l'activation thermique du franchissement d'un soluté d'Al par des dislocations coin et vis. Nous considérons uniquement des dislocations partielles de queue.
Dans le cadre de la théorie de l'état de transition, nous analysons la variation de l'enthalpie d'activation et de la fréquence d'attaque en fonction de la contrainte appliquée. Afin de mettre en œuvre cette théorie, nous calculons également dans le Ni pur certaines propriétés dynamiques des dislocations comme leur inertie et leur amortissement effectifs.

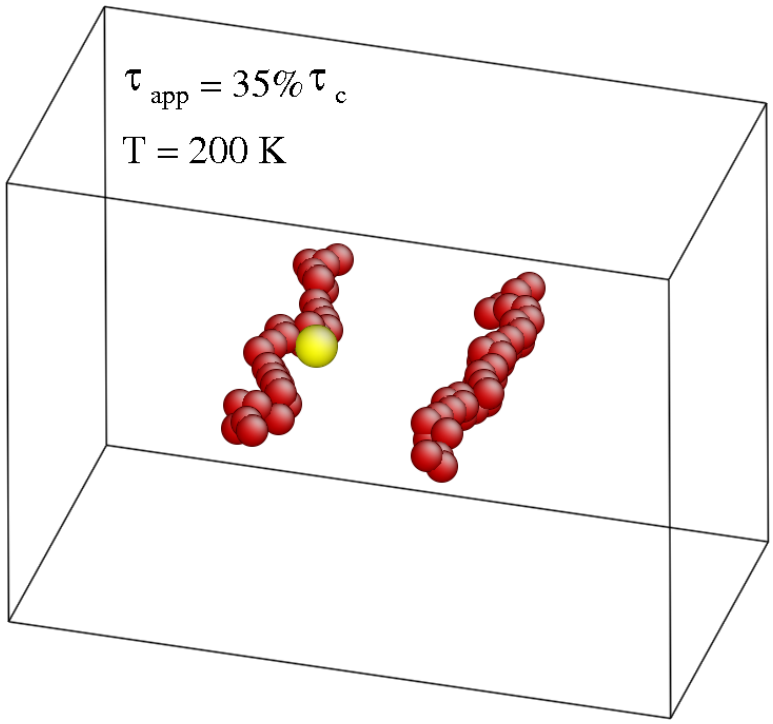


FIGURE 4.1 – *Image caractéristique des simulations de dynamique moléculaire décrites dans ce chapitre. Les simulations sont réalisées à une contrainte imposée constante et inférieure à la contrainte critique statique. Les atomes représentés appartiennent aux dislocations partielles (rouge). Oscillant autour de sa position d'équilibre, la dislocation est ancrée par sa dislocation partielle de queue sur un atome de soluté substitutionnel (jaune).*

4.1 Temps d'attente de franchissement du soluté

4.1.1 Calcul du temps d'attente

Nous souhaitons caractériser l'activation thermique du franchissement d'un soluté par une dislocation. Ici, ce n'est plus seulement l'énergie mécanique mais également l'énergie thermique qui permet le franchissement des obstacles. La DM nous offre un accès direct au comportement thermique des dislocations en interaction avec les solutés. Cette méthode de simulation est néanmoins gourmande en temps de calcul. En effet, contrairement aux simulations statiques précédentes, la DM est par nature stochastique et nécessite un grand nombre de réalisations pour pouvoir raisonner sur des valeurs moyennes. D'autre part, les processus thermiquement activés sont caractérisés par des événements rares (Marcelin 1915) qui requièrent d'intégrer la dynamique du système sur des temps longs ce qui augmente d'autant plus le coût des calculs.

Pour simuler les processus thermiquement activés avec les moyens de calcul actuels, les travaux précédents ont le plus souvent utilisé des simulations de DM pilotées en vitesse de déformation constante (Osetsky et Bacon 2003, Tapasa et al. 2007, Rodney 2007). Ces simulations consistent à appliquer une vitesse de cisaillement constante sur les surfaces du cristal et à calculer la contrainte résultante au cours du glissement de la dislocation.
Si ce type de simulation a permis l'étude de l'activation thermique du franchissement d'obstacle par les dislocations, il pose le problème de la signification physique de la vitesse de déformation. Comme nous l'avons vu dans le chapitre 1, la vitesse de déformation d'un métal lors d'un essai mécanique de traction se situe autour de $\dot{\epsilon} \approx 10^{-4} s^{-1}$ quand celle des simulations de DM de dimensions classiques vaut $\dot{\epsilon} \approx 10^{8} s^{-1}$. Cette différence de douze ordres de grandeur a plusieurs origines. Elle est due en premier lieu au volume réduit des simulations qui implique une densité de dislocations ρ importante laquelle intervient dans le calcul de la vitesse de déformation à travers la formule d'Orowan :

$$\dot{\epsilon} = \rho b v, \tag{4.1}$$

où v est la vitesse moyenne des dislocations. En augmentant la taille des systèmes de simulation, il est donc possible de diminuer $\dot{\epsilon}$. Toutefois, même pour des simulations massivement parallèles pouvant atteindre des volumes micrométriques, $\dot{\epsilon}$ ne diminue que de quatre ordres de grandeur. La différence de vitesse de déformation entre expérience et simulation provient également de la comparaison directe entre la vitesse de déformation imposée lors de l'expérience et celle des simulations calculée par la formule d'Orowan. En effet, contrairement aux simulations, lorsqu'un métal est déformé plastiquement toutes ses dislocations ne sont pas mises en mouvement et il en résulte une vitesse de déformation beaucoup moins élevée. Enfin une dernière source de différence dans la comparaison avec les vitesses de déformation expérimentales se situe dans la limitation temporelle intrinsèque provenant de la fréquence de vibration atomique. En effet, comme il est nécessaire d'intégrer la dynamique des atomes

avec un pas de l'ordre de la femto-seconde, une simulation de DM simule un temps d'une nanoseconde en deux semaines de calcul. Dans ces conditions, il est difficile d'atteindre les temps caractéristiques d'un essai mécanique expérimental de plusieurs secondes.
Les simulations à vitesse de déformation constante posent également problème dans l'étude spécifique des processus thermiquement activés. Dans ces simulations, lorsque la dislocation est au contact d'un obstacle, la contrainte augmente brusquement et fait chuter le temps d'attente de franchissement de l'obstacle. Dans certains cas, la durée de l'interaction dislocation-obstacle se réduit alors à une dizaine de picosecondes ce qui peut ne pas être suffisant pour décrire le franchissement comme un mécanisme thermiquement activé supposant l'équilibre thermodynamique.

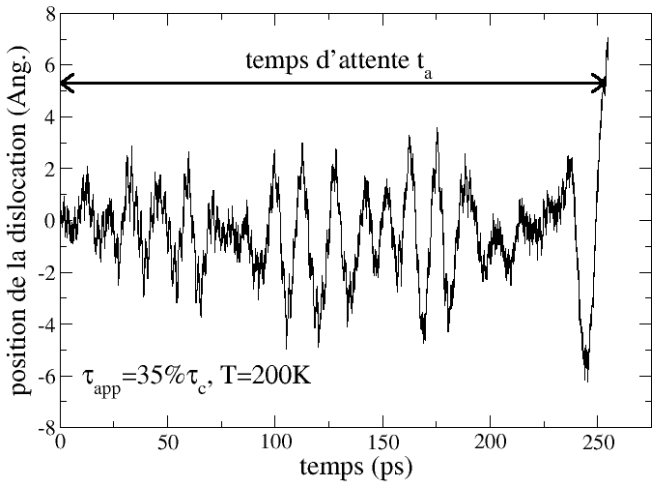


FIGURE 4.2 – *Position moyenne d'une dislocation coin en fonction du temps de simulation. La simulation est réalisée dans le nickel à une température de* 200*K avec une contrainte imposée égale à* 35% *de la contrainte critique. La dislocation est ancrée sur un atome d'aluminium. Elle oscille dans son puits de potentiel jusqu'au franchissement de l'obstacle au temps d'attente* t_a.

Afin de contourner les difficultés liées aux simulations réalisées à une vitesse de déformation constante, nous effectuons des simulations de DM en imposant une contrainte constante. En outre, nous choisissons de travailler à contrainte constante car expérimentalement le niveau de la contrainte reste constant autour de chaque dislocation aux échelles de temps considérées dans nos simulations. Au lieu de calculer la contrainte au cours du cisaillement de l'obstacle par la dislocation, nous calculons dans ces simulations le temps d'attente t_a nécessaire à la dislocation pour franchir un atome de soluté sous l'action conjuguée des fluctuations thermiques et de la contrainte. Notons que des calculs similaires de déformation constante ont été réalisés par Hirel et al. (2008) pour déterminer les paramètres d'activation de la formation de dislocation à partir d'une marche de surface.
Les simulations de DM que nous mettons en œuvre sont basées sur l'algorithme de Verlet, lequel résout la dynamique newtonienne classique des

atomes. Nous choisissons un pas de temps égal à une femto-seconde pour lequel nous n'observons pas de dérive de l'énergie totale de notre système sur les durées simulées dans cette étude. Afin de ne pas biaiser la dynamique des atomes, nous n'utilisons pas de thermostat pour maintenir la température constante. Ceci est rendu possible par le fait que la dislocation reste ancrée sur l'obstacle durant la majorité de la simulation et ne dissipe pas d'énergie sous forme de chaleur en glissant.
La configuration atomique de départ de nos simulations de DM correspond à celle obtenue par un calcul statique sous contrainte c'est-à-dire à la configuration d'équilibre d'une dislocation poussée contre un soluté. La contrainte appliquée dans les simulations de DM coïncide avec la contrainte des simulations statiques fournissant la configuration atomique de départ. Au début de la simulation, nous appliquons une vitesse aléatoire à chaque atome suivant la distribution de Boltzmann. Après un court temps de thermalisation (très petit devant le temps d'attente), la température moyenne converge vers la température de simulation souhaitée. Cette température correspond à la moitié de l'énergie cinétique introduite dans le système suivant le théorème d'équirépartition. Plus la température augmente et moins cette relation simple est vérifiée. Nous calculons alors la température moyenne comme un résultat de la simulation.
Pour certaines conditions de température et de contrainte, les simulations peuvent nécessiter une DM de plusieurs nanosecondes. Nous nous restreignons par conséquent à l'étude de dislocations courtes dont la longueur de ligne est égale à $Ly = 13,8b$ et $Ly = 8b$ respectivement pour les dislocations coin et vis. Pour les deux types de dislocations, l'obstacle considéré est un soluté d'Al placé sur le plan au-dessus du plan de glissement ancrant la dislocation partielle de queue. L'ancrage de la dislocation partielle de queue nous assurent qu'une fois le soluté franchi, la dislocation ne rencontre plus de position stable et glisse dans le cristal. Nous avons réalisé des simulations de DM pour une contrainte égale à 10%, 35%, 65% et 90% de la contrainte critique statique τ_c couvrant une gamme de température allant de 5 K à 1100 K. La figure 4.2 représente un exemple de trajectoire d'une dislocation à partir de laquelle nous calculons le temps d'attente t_a de franchissement d'un atome Al. Ce temps correspond à l'instant où la position moyenne de la dislocation franchit un seuil pour lequel la dislocation partielle de queue a traversé l'obstacle. La dislocation glisse alors librement dans la matrice de Ni.

4.1.2 Statistique du temps d'attente

Le calcul des temps d'attente t_a fait apparaître un processus aléatoire caractéristique des phénomènes thermiquement activés. Nous manipulons ici des grandeurs moyennes à la place des valeurs déterministes comme celle de la contrainte critique des simulations statiques des chapitres précédents. Il est utile de connaître la statistique des temps d'attente pour caractériser le franchissement des obstacles et prévoir le nombre de simulations nécessaires au calcul des moyennes de t_a.

Nous réalisons une série de cent simulations afin de calculer les temps d'attente d'une dislocation coin pour une contrainte appliquée τ_{app} égale

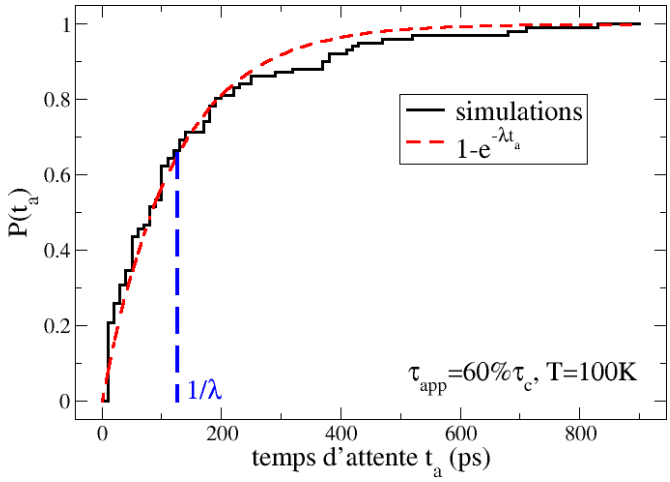


FIGURE 4.3 – *Fonction de distribution des temps d'attente d'une dislocation coin dans le nickel franchissant un atome d'aluminium. La probabilité P pour la dislocation d'avoir franchi l'obstacle est représentée en fonction du temps d'attente. Les résultats de simulations correspondent à 100 réalisations obtenues à une température de* 100*K pour une contrainte imposée égale à* 60% *de la contrainte critique. Nous modélisons la distribution des temps d'attente par une loi de probabilité exponentielle de paramètre* λ *découlant d'un processus de Poisson.*

à 60% de la contrainte critique statique τ_c à une température T de 100 K. L'unique différence entre ces cent simulations est la graine du générateur aléatoire utilisée lors de l'attribution des vitesses initiales. Ces simulations sont donc équivalentes thermodynamiquement mais la trajectoire de leurs atomes est particulière ce qui conduit à des temps d'attente différents. Les temps d'attente se distribuent sur une large gamme allant de 1 à 800 picosecondes. La fonction de distribution des temps d'attente est reportée sur la figure 4.3. Le franchissement d'un obstacle est caractéristique d'un processus de Poisson dont les événements sont non corrélés. Cette caractéristique est importante car elle permet de montrer que le phénomène de franchissement peut être modélisé par une distribution de temps d'attente exponentielle. Cette loi de probabilité est souvent utilisée pour modéliser la durée de vie d'un élément radioactif ou celle d'un composant électronique.

Comme reporté sur la figure 4.3, nous modélisons la fonction de distribution des temps d'attente par une loi exponentielle. t_a est alors une variable aléatoire définissant la durée de vie d'un phénomène, ici, le temps d'attente avant franchissement du soluté. Si l'espérance du temps d'attente est $E(t_a)$ et si la durée du temps d'attente est sans vieillissement, c'est-à-dire si le temps d'attente au-delà de l'instant t est indépendant de l'instant t, alors t_a a pour fonction de distribution :

$$\begin{aligned} &P(t_a) = 0 \text{ si } t_a = 0, \\ &P(t_a) = 1 - \exp\left(-\frac{t_a}{E(t_a)}\right) \text{ pour tout } t_a \geq 0, \end{aligned} \tag{4.2}$$

et nous disons que t_a suit une loi exponentielle de paramètre $\lambda = 1/E(t_a)$.

Nous pouvons ainsi évaluer l'erreur que nous commettons sur l'estimation de $E(t_a)$ en fonction du nombre N de simulations réalisées. L'estimateur de $E(t_a)$ est bien entendu la moyenne $\bar{t}_a$ des temps d'attente. La manière dont fluctue $\bar{t}_a$ autour de son espérance dépend de sa variance. La variance de l'estimateur $\bar{t}_a$ nous est donnée par :

$$VAR(\bar{t}_a) = \frac{VAR(t_a)}{N}. \tag{4.3}$$

Or, si t_a suit une loi de probabilité exponentielle sa variance est égale à $VAR(t_a) = 1/\lambda^2 = E(t_a)^2$. Nous pouvons donc estimer la valeur de l'erreur relative Δ_ϵ commise sur l'espérance du temps d'attente comme :

$$\Delta_\epsilon = \frac{\sqrt{VAR(\bar{t}_a)}}{E(t_a)} = \frac{E(t_a)}{E(t_a)\sqrt{N}} = \frac{1}{\sqrt{N}}. \tag{4.4}$$

Empiriquement, la moyenne $\bar{t}_a$ converge dans la plupart des cas avant la quinzième réalisation du calcul de t_a. Nous choisissons de réaliser le calcul de la moyenne $\bar{t}_a$ sur un échantillonnage de vingt réalisations. L'application de l'équation 4.4 avec $N = 20$ nous indique que nous effectuons un calcul de $E(t_a)$ à 22% près. Il s'agit d'un compromis nous permettant d'estimer l'espérance du temps d'attente sur une large gamme de températures tout en garantissant une certaine précision.

4.2 Variation de l'enthalpie d'activation avec la contrainte

4.2.1 Variation du temps d'attente moyen en fonction de la température et de la contrainte appliquée

Les résultats des moyennes des temps d'attente $\bar{t}_a$ calculés à partir de 20 réalisations pour chaque couple de variables (τ_{app}, T) sont reportés sur les figures 4.4 et 4.5 respectivement pour les dislocations coin et vis. Pour les gammes de contrainte τ_{app} et de températures T appliquées, les simulations les plus longues s'étendent jusqu'à un temps d'attente de franchissement du soluté pouvant atteindre 10 nanosecondes.

Nous observons une diminution du temps d'attente moyen avec l'accroissement de la température et de la contrainte appliquée. En effet, plus nous fournissons à la dislocation de l'énergie sous forme thermique ou mécanique, plus il lui est aisé de franchir l'atome de soluté. Aux basses températures, la décroissance de $\bar{t}_a$ est brusque, caractérisant un phénomène thermiquement activé (Glasstone et al. 1941, Hänggi et al. 1990). À plus haute température, $\bar{t}_a$ diminue jusqu'à un plateau et ne dépend plus de la température.
D'un point de vue qualitatif, nous n'observons pas de différences de comportement entre les dislocations de caractère coin et vis. Nous notons que plus la moyenne des temps d'attente $\bar{t}_a$ décroît plus la dispersion diminue également. La modélisation de la distribution des temps d'attente comme une loi de probabilité exponentielle est confirmée par le fait que les écarts types empiriques sont très proches des moyennes des temps d'attente.

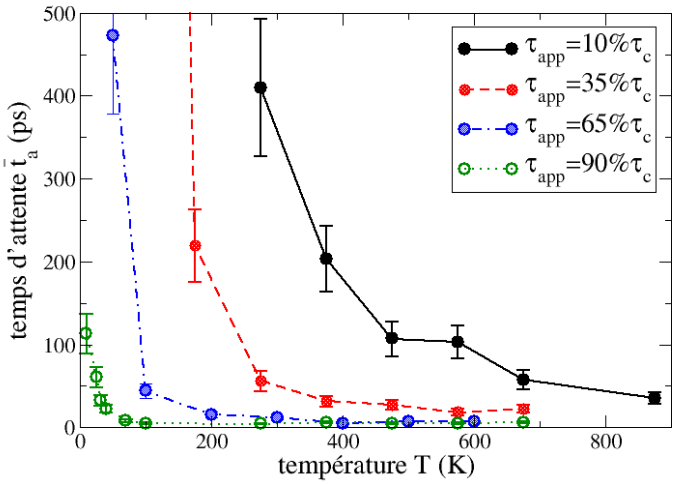


FIGURE 4.4 – *Temps d'attente moyen $\bar{t}_a$ de franchissement d'un atome d'aluminium pour une dislocation coin dans le nickel en fonction de la température. Les courbes correspondent aux différentes fractions de la contrainte critique appliquée au système.*

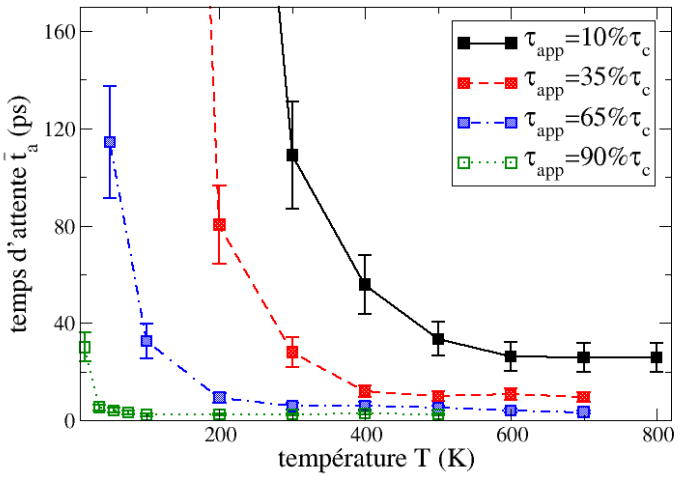


FIGURE 4.5 – *Même graphique que 4.4 pour une dislocation vis franchissant un atome d'aluminium.*

4.2.2 Calcul de l'enthalpie d'activation

Afin d'interpréter les résultats des calculs de DM, nous analysons les calculs des temps d'attente moyens à travers la théorie de l'état de transition (TET). Cette théorie a été appliquée dans de nombreux travaux aux dislocations pour modéliser l'activation thermique du franchissement des obstacles (Friedel 1964, Kocks et al. 1975).

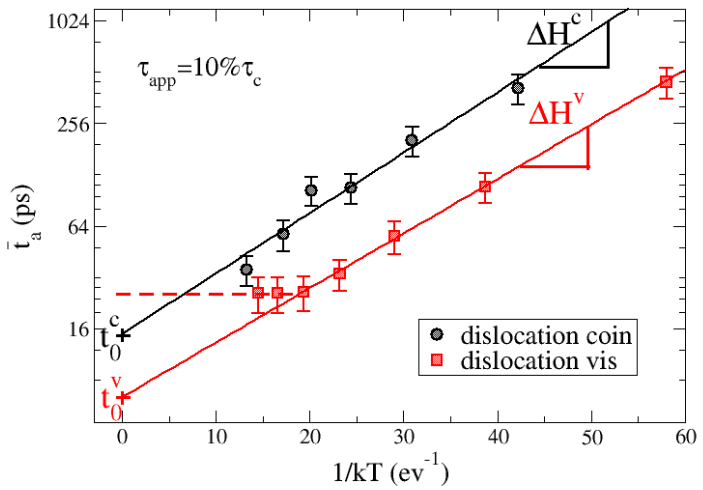


FIGURE 4.6 – *Temps d'attente en fonction de l'inverse de la température pour une dislocation coin (symboles circulaires) et vis (symboles carrés) dans le nickel franchissant un atome d'aluminium à une contrainte imposée égale à* 10% *de la contrainte critique. Les courbes représentent les ajustements des résultats de simulation sur la théorie de l'état de transition. La pente mesure l'enthalpie d'activation* ΔH *et l'ordonnée à l'origine l'inverse de la fréquence d'attaque* t_0*. Pour les hautes températures le temps d'attente d'une dislocation vis devient indépendant de la température (traits pointillés).*

Les simulations en température montrent que la dislocation peut sauter la barrière d'énergie même à une contrainte inférieure à la contrainte d'écoulement τ_c. Il existe dans le système des fluctuations thermiques qui représentent une propriété d'équilibre d'un corps à température constante. Ces fluctuations redistribuent en permanence l'énergie du système entre ses différentes configurations. Il existe alors une probabilité P_f non-nulle (dite de Boltzmann) que la dislocation surmonte la barrière d'énergie associée au soluté. Selon la TET, le taux d'activation ν dépend également de la fréquence d'attaque ν_0 du mode de vibration qui permet le saut de la dislocation. ν peut alors s'écrire comme le produit de la fréquence d'attaque ν_0 par la probabilité de succès d'un saut P_f tel que :

$$\nu = \nu_0 P_f. \tag{4.5}$$

La probabilité de succès P_f peut être définie comme la probabilité qu'une fluctuation d'énergie soit supérieure à l'énergie libre de Gibbs ΔG, c'est-à-dire à la barrière à franchir sous l'action de la contrainte. Étant donné une température T, la probabilité qu'une fluctuation thermique à l'équilibre

possède une énergie supérieure à ΔG est égale au terme de Boltzmann :

$$P_f = \exp(-\frac{\Delta G}{kT}), \tag{4.6}$$

où k est la constante de Boltzmann. Par ailleurs l'énergie libre de Gibbs du système dépend de l'enthalpie d'activation ΔH et d'une entropie d'activation ΔS du système par la relation thermodynamique :

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S. \tag{4.7}$$

En utilisant les relations 4.6 et 4.7, nous pouvons montrer que l'équation 4.5 s'écrit :

$$\nu = \nu_0 \exp(\frac{\Delta S}{k}) \exp(-\frac{\Delta H}{kT}) = \nu_{eff} \exp(-\frac{\Delta H}{kT}), \tag{4.8}$$

avec ν_{eff} la fréquence d'attaque effective. Cette fréquence est obtenue en considérant tous les chemins de saut ou modes de vibration possibles. Dans sa théorie, Vineyard (1957) compare tous les modes de vibration autour de la position instable B, séparant les états initiaux des états finaux, aux modes de vibration autour de la position stable A. Il fournit une expression explicite de ν_{eff} :

$$\nu_{eff} = \frac{\prod_{i=1}^{3N} \nu_i^A}{\prod_{i=1}^{3N-1} \nu_i^B}, \tag{4.9}$$

pour un système possédant 3N modes indépendants autour de la position stable. Les fréquences ν_i autour des états stables et instables sont traitées dans le cadre de l'approximation harmonique. Le temps d'attente du saut de la dislocation vaut alors :

$$\bar{t}_a = \frac{1}{\nu} = \frac{1}{\nu_{eff}} \exp(\frac{\Delta H}{kT}) = t_0 \exp(\frac{\Delta H}{kT}), \tag{4.10}$$

où t_0 est l'équivalent d'une période d'attaque. Les paramètres d'interpolation de nos résultats sont donc la période t_0 du mode permettant le décrochage de la dislocation et l'enthalpie d'activation ΔH. Un exemple de calcul de ces paramètres pour une contrainte égale à 10% de la contrainte critique est reporté sur la figure 4.6. La représentation de $\bar{t}_a$ sur une échelle semi-logarithmique en fonction de $1/kT$ montre clairement une dépendance linéaire dont la pente correspond à ΔH et l'ordonnée à l'origine à t_0.

La TET est valide pour une barrière d'énergie $\Delta H \gg kT$ (Glasstone et al. 1941, Kocks et al. 1975). Cette hypothèse n'est vérifiée que pour certaines valeurs de température pour lesquelles le saut de la dislocation constitue un événement rare. L'ajustement des résultats de simulations doit être effectué seulement sur la partie thermiquement activée. Sur la figure 4.6, nous distinguons pour la dislocation vis le régime d'activation thermique pour lequel $\bar{t}_a$ suit une décroissance exponentielle avec la température du

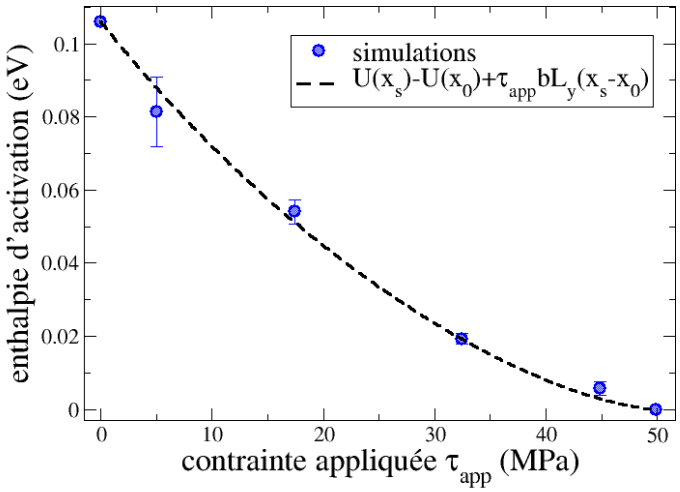


FIGURE 4.7 – *Enthalpie d'activation du franchissement d'un atome d'aluminium par une dislocation coin dans le nickel en fonction de la contrainte appliquée au système. Les symboles circulaires correspondent aux résultats obtenus directement de la simulation et la courbe (trait interrompu) représente la barrière d'activation déduite du paysage énergétique présenté sur la figure 4.9.*

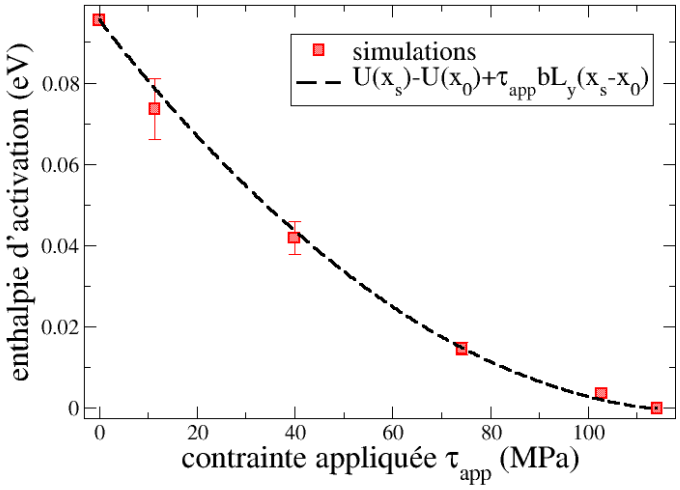


FIGURE 4.8 – *Même graphique que 4.7 pour une dislocation vis franchissant un atome d'aluminium.*

régime athermique où $\bar{t}_a$ ne dépend plus de la température.

En interpolant les résultats de simulation correspondant au régime d'activation thermique nous obtenons le préfacteur $t_0 = 1/\nu_{eff}$ et l'enthalpie d'activation ΔH. Cette démarche est répétée pour chaque contrainte étudiée. La variation de l'enthalpie d'activation en fonction de la contrainte appliquée est reportée sur les figures 4.7 et 4.8 respectivement pour les dislocations coin et vis. Nous observons une décroissance de l'enthalpie d'activation avec la contrainte appliquée ce qui traduit une augmentation de la probabilité de saut de la dislocation avec l'apport d'énergie mécanique. Nous reportons également sur les graphiques 4.7 et 4.8 deux valeurs supplémentaires de l'enthalpie déduites des calculs statiques pour $\tau_{app} = 0$ et $\tau_{app} = \tau_c$. À $\tau_{app} = 0$, l'enthalpie d'activation ΔH_0 correspond à la barrière d'énergie interne calculée à partir du paysage énergétique obtenu dans le chapitre précédent lors du calcul de la portée d'interaction (cf. figure 3.20 page 93). À $\tau_{app} = \tau_c$, l'enthalpie d'activation est nulle car la contrainte est suffisante pour mettre en mouvement la dislocation sans l'aide de l'énergie thermique.

4.2.3 Enthalpie d'activation déduite du paysage d'énergie interne

Afin de donner une expression à la variation de l'enthalpie d'activation en fonction de la contrainte appliquée, il est commode d'utiliser la formulation empirique de l'enthalpie d'activation proposée par Kocks et al. (1975) :

$$\Delta H = \Delta H_0 \left[1 - \left(\frac{\tau_{app}}{\tau_c} \right)^p \right]^q , \tag{4.11}$$

avec p et q deux paramètres ajustables bornés pour lesquels il est possible de montrer que

$$0 < p \leq 1 \qquad \text{et} \qquad 1 \leq q \leq 2. \tag{4.12}$$

Après ajustement de l'équation 4.11 sur les données issues de nos simulations, nous obtenons $p_c = 0,75$; $q_c = 1,21$ pour la dislocation coin et $p_v = 0,78$; $q_v = 1,45$ pour la dislocation vis. Les résultats expérimentaux font état de plusieurs modèles de variation de l'enthalpie d'activation qui diffèrent selon les valeurs des paramètres p et q. Nos résultats présentent un bon accord avec le modèle empirique de Frost et Ashby (1982) pour lequel $p = 3/4 = 0,75$ et $q = 4/3 = 1,33$ contrairement au modèle empirique de Ono (1968) dont les paramètres de l'équation 4.11 valent $p = 1/2 = 0,5$ et $q = 3/2 = 1,5$. Ce résultat est raisonnable étant donné que le modèle de Frost et Ashby est généralement bien adapté aux obstacles à courte portée tels que les vallées de Peierls et les atomes de soluté (François et al. 1995). Par opposition, le modèle d'Ono décrit mieux les cas d'obstacles forts et discrets tels que les précipités (Kocks et al. 1975).
Afin d'éviter l'ajustement de l'enthalpie d'activation sur une loi empirique, nous pouvons calculer la variation de la barrière d'énergie en fonction du travail de la contrainte appliquée. Ce calcul peut être effectué à partir de résultats obtenus dans des simulations statiques. C'est ce qui a été réalisé par Rodney (2007) dans l'étude de la nucléation des paires de décrochements le long d'une dislocation de Lomer-Cottrell dans l'Al.

Dans cette étude, Rodney (2007) déduit l'enthalpie d'activation de nucléation des décrochements à partir des simulations de DM. Il montre alors que ce calcul coïncide avec le calcul statique de la barrière d'énergie obtenu à partir de la méthode NEB (*Nudged Elastic Band* en anglais) développée par Jónsson et al. (1998).

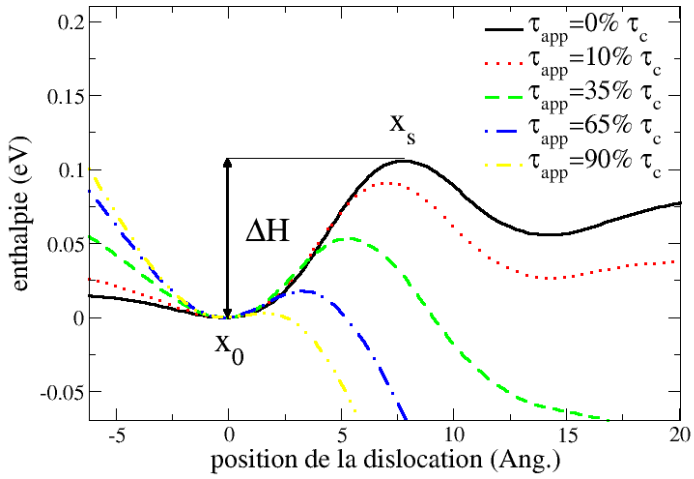


FIGURE 4.9 – *Enthalpie en fonction de la position de la dislocation coin dans le nickel franchissant un atome d'aluminium. Le trait continu représente l'énergie interne $U(x)$ calculée par les simulations atomistiques statiques. L'enthalpie (traits discontinus) est tracée pour différentes fractions de la contrainte critique à partir de l'équation 4.13. L'enthalpie d'activation ΔH est calculée comme la différence des enthalpies à la position stable x_0 et à la position de col x_s.*

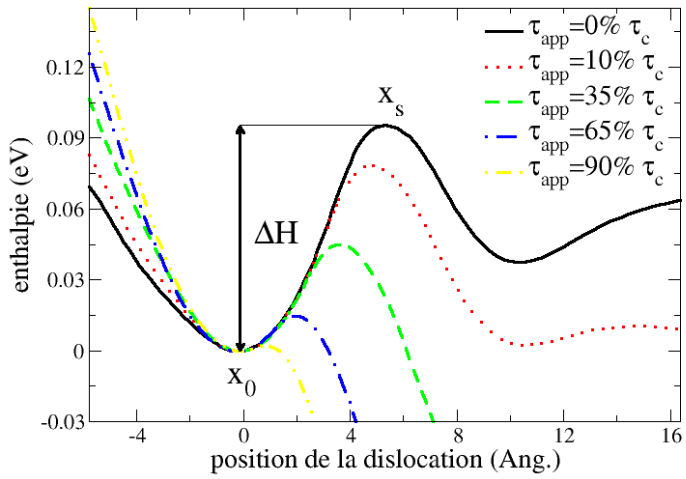


FIGURE 4.10 – *Même graphique que 4.9 pour une dislocation vis franchissant un atome d'aluminium.*

Dans le cas du franchissement d'un soluté par une dislocation, nous

disposons du paysage d'énergie interne $U(x)$ fonction de la position de la dislocation x. C'est le paysage d'énergie qui a été obtenu dans le chapitre précédent lors du calcul de la portée d'interaction (cf. figure 3.20 page 93). Pour les niveaux de contrainte étudiés ici, ce paysage peut être supposé comme variant peu avec la contrainte imposée. Nous négligeons donc cette variation identifiée par Rodney et Proville (2009) dans le cas des barrières de Peierls. À partir de ce potentiel d'interaction dislocation-soluté, nous pouvons écrire formellement l'enthalpie d'activation en fonction du travail de la contrainte appliquée comme :

$$\Delta H = U(x_s) - U(x_0) - \int_{x_0}^{x_s} \tau_{app} b L_y dx, \tag{4.13}$$

où les coordonnées x_0 et x_s sont respectivement les positions stables et instables de la dislocation. x_0 se situe au fond du puits de potentiel provenant de l'interaction dislocation-soluté. Cette position stable correspond à la position de départ de la simulation pour laquelle la dislocation est poussée en équilibre contre l'atome de soluté. La position instable x_s est la position de col qui, une fois atteinte, signifie le franchissement de l'obstacle par la dislocation. Les paysages d'enthalpie calculés à partir du travail de la contrainte sont reportés sur les figures 4.9 et 4.10 respectivement pour les dislocations coin et vis. Nous identifions alors les positions stables et instables en fonction de la contrainte appliquée et calculons ΔH à partir de l'équation 4.13. Les résultats du calcul de ΔH sont tracés sur les figures 4.7 et 4.8. Nous obtenons un accord quantitatif entre la variation de l'enthalpie en fonction de la contrainte appliquée déduite des simulations de DM et celle calculée à partir des paysages d'énergie interne.

4.3 Propriétés dynamiques d'une dislocation en absence de soluté

Une fois libérée de l'ancrage dû à la présence de l'atome de soluté, la dynamique des dislocations n'est plus contrôlée par le mécanisme d'activation thermique et les dislocations glissent dans la matrice pure. Les paramètres pilotant cette dynamique sont néanmoins utiles dans la modélisation de la fréquence d'attaque ν_{eff} caractérisant l'activation thermique au travers de l'équation 4.8. En outre, ils permettent de décrire les régimes de vibration d'une dislocation ancrée entre deux obstacles (Walcker et al. 2005). Ces paramètres sont la masse effective de la dislocation m^* et le coefficient de frottement B ressenti par la dislocation. Afin de mettre en œuvre les calculs théoriques de la fréquence d'attaque, nous nous proposons dans cette section de calculer les paramètres pilotant la dynamique de la dislocation à partir de simulations dans une matrice de Ni pure.

4.3.1 Accélération d'une dislocation et calcul de sa masse effective

Comme dans les simulations précédentes, nous commençons les simulations à partir d'une configuration statique pour laquelle la dislocation est au repos. Nous appliquons une contrainte externe constante au moins supérieure à la contrainte de Peierls. La dislocation répond à la sollicitation en accélérant jusqu'à ce que sa vitesse soit limitée par les mécanismes

de frottement dissipant le travail de la contrainte appliquée. La température du système augmente alors légèrement au cours du glissement de la dislocation. Contrairement aux simulations de temps d'attente, nous utilisons donc un thermostat développé par Berendsen et al. (1984) pour maintenir la température autour d'une valeur constante. Nous notons néanmoins que les calculs que nous avons effectués montrent une très faible dépendance à l'utilisation ou non d'un thermostat.

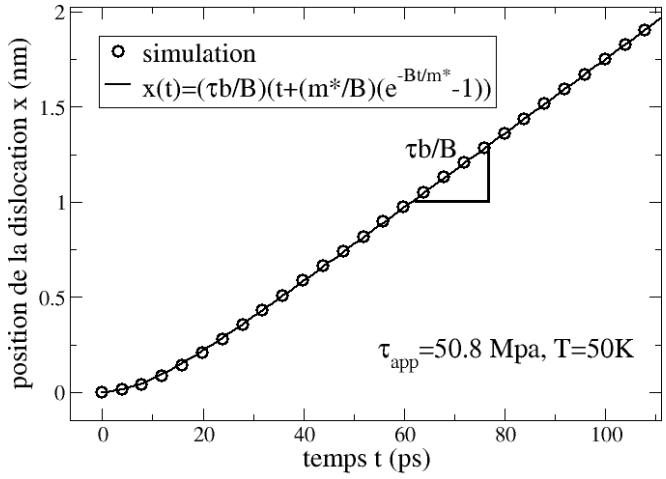


FIGURE 4.11 – *Position moyenne d'une dislocation coin dans le nickel pur en fonction du temps de simulation. Les symboles représentent les résultats de simulation et la courbe leurs ajustements sur l'équation décrivant la dynamique d'une particule de masse m^* subissant un frottement linéaire B. La température du système est de* 50K *et la contrainte appliquée est égale à* 50.8 *MPa. À l'origine, la dislocation est au repos puis elle accélère jusqu'à atteindre une vitesse stationnaire.*

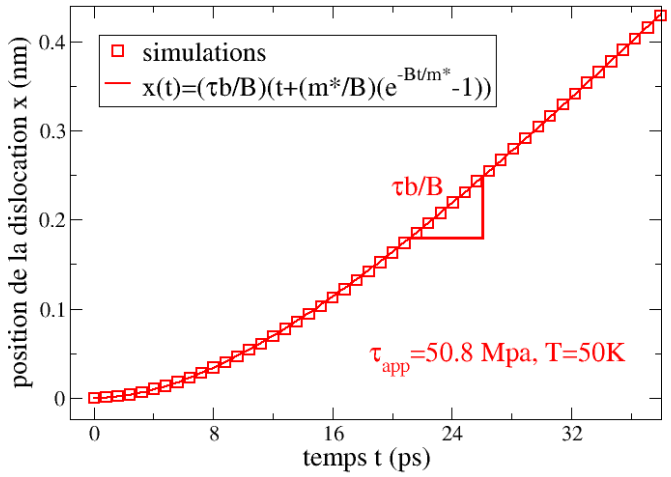


FIGURE 4.12 – *Même graphique que 4.11 pour une dislocation vis dans le nickel pur.*

Les positions des dislocations soumises à une contrainte de $\tau_{app} = 50,8$ MPa à une température de 50K sont reportées sur les figures 4.11 et 4.12 respectivement pour les dislocations coin et vis. En faisant l'analogie entre une particule et une dislocation, la dynamique de la dislocation au cours du temps t peut s'écrire sous la forme (Granato et al. 1963) :

$$m^* \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + B \frac{\partial x}{\partial t} = F, \tag{4.14}$$

avec x la position de la dislocation, m^* la masse effective par unité de longueur de la dislocation, B le coefficient de frottement et $F = \tau_{app} b$ la force de Peach-Koehler exercée sur la dislocation. Notons que cette équation n'est plus valide pour des régimes de vitesse transsonique et supersonique présentant une plus grande complexité dans les phénomènes de dissipation et d'inertie (Pillon et al. 2007). Nous résolvons l'équation différentielle 4.3.2 avec comme condition d'intégration une vitesse initiale $\partial x / \partial t = 0$ et une position initiale $x = 0$ à $t = 0$. Nous obtenons la position de la dislocation en fonction du temps et des paramètres physiques caractérisant la dynamique de la dislocation :

$$x(t) = \frac{\tau_{app} b}{B} \left[t + \frac{m^*}{B} (\exp(-\frac{B}{m^*} t) - 1) \right]. \tag{4.15}$$

Les ajustements de l'équation 4.15 sur les résultats des simulations sont reportés sur les figures 4.11 et 4.12. Nous calculons pour la dislocation coin $m_c^* = 66,88.10^{-18} Kg/m$ et pour la dislocation vis $m_v^* = 98,77.10^{-18} Kg/m$. Le rapport des masses effectives des deux types de dislocations est en désaccord avec le calcul théorique de Sakamoto (1991) pour lequel $m_c^*/m_v^* = (1 + C_t^4/C_l^4) = 1,09$ où C_t et C_l sont respectivement les vitesses du son transversale et longitudinale.
Avant de nous pencher sur le frottement effectif B, nous notons que la masse effective m^* est un paramètre important dans la description inertielle de l'interaction entre un obstacle et une dislocation. En effet, comme l'ont étudié Bitzek et Gumbsch (2004; 2005) dans le cas d'une interaction avec une marche de surface ou une cavité, une dislocation lancée sur un obstacle possède une certaine énergie cinétique qui réduit la barrière d'énergie effective de l'obstacle. Cet effet inertiel n'est pas présent dans nos simulations de calcul de temps d'attente avant franchissement du soluté car nous partons de configurations de dislocations au repos.

4.3.2 Vitesse stationnaire d'une dislocation et calcul du frottement effectif

Passé un certain temps, la dislocation cesse d'accélérer et atteint une vitesse stationnaire comme reportée sur les figures 4.11 et 4.12. Ce comportement est lié au frottement B. L'existence d'un frottement s'opposant au mouvement de la dislocation provient de l'interaction de celle-ci avec les phonons du cristal dans lequel elle évolue. L'interaction avec les phonons possède plusieurs origines qui ont été décrites théoriquement par Brailsford (1975; 1981) et Alshits (1992). Nous distinguons principalement les mécanismes de flottement et les mécanismes de diffraction ou diffusion. Dans le premier mécanisme, la dislocation oscille du fait des

phonons incidents et émet à son tour des phonons. Cette énergie élastique se dissipe alors dans le cristal. Dans le second cas, les déformations non linéaires et le changement de densité près du cœur de la dislocation provoquent la diffusion des phonons. Ces derniers emportent chacun une quantité de mouvement proportionnelle à la vitesse de la dislocation. La perte d'énergie liée à ces deux mécanismes conduit à la création du frottement d'origine phononique.

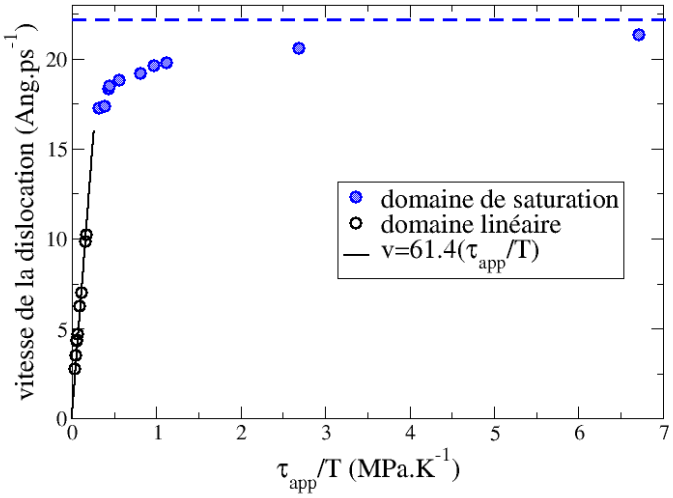


FIGURE 4.13 – *Vitesse moyenne stationnaire après accélération d'une dislocation coin dans le nickel pur en fonction du rapport entre la contrainte et la température. Les symboles représentent les résultats de simulation. La droite (trait plein) correspond à l'ajustement des simulations sur une relation linéaire pour les faibles contraintes ou les fortes températures. Au-delà, la vitesse tend vers une vitesse de saturation représentée par un trait discontinu.*

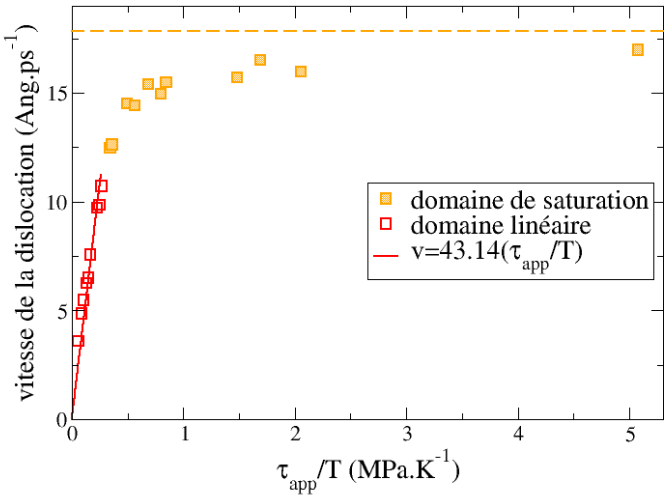


FIGURE 4.14 – *Même graphique que 4.13 pour une dislocation vis dans le nickel pur.*

Lorsque la dislocation atteint un état stationnaire, le terme inertiel $m^*\partial^2 x/\partial t^2$ de l'équation s'annule. Nous obtenons alors la relation :

$$Bv = \tau_{app} b, \tag{4.16}$$

où v est la vitesse stationnaire de la dislocation. Comme le coefficient B provient de l'interaction entre dislocations et phonons, il dépend de la température à l'instar de la population de phonons. Fixant la contrainte appliquée et la température, nous calculons la vitesse stationnaire atteinte par une dislocation dans la matrice de Ni. Nous obtenons les graphiques 4.13 et 4.14 respectivement pour les dislocations coin et vis. Suivant Olmsted et al. (2005), nous choisissons d'étudier la variation v avec le rapport τ_{app}/T. Nous constatons alors que les résultats de simulation suivent une courbe maîtresse plus aisée à interpréter. Nous observons que v croît linéairement avec τ_{app}/T jusqu'à $0,3$ MPa/K pour une dislocation coin et $0,4$ MPa/K pour une dislocation vis en accord avec les simulations de Olmsted et al. (2005). Dans ce régime des basses contraintes et hautes températures, le coefficient B dépend donc linéairement de la température.

La dépendance linéaire du frottement B avec la température a déjà été obtenue dans plusieurs simulations de DM par Mordehai et al. (2003) dans le Cu, par Bitzek et Gumbsch (2004), Olmsted et al. (2005) dans le Ni et par Olmsted et al. (2005), Kuksin et al. (2008) dans l'Al. D'autre part, la relation linéaire de B avec la température a été observée expérimentalement à basse température par Hikata et al. (1970a;b) dans l'Al et par Hikata et al. (1972) dans le NaCl. À très basse température, ces expériences mettent en évidence un frottement d'origine électronique indépendant de la température absent de nos simulations.
Suivant Bitzek et Gumbsch (2005), nous pouvons comparer nos résultats avec le modèle proposé par Liebfried (1950) pour lequel le coefficient de frottement est lié linéairement à la température par l'équation :

$$B = \frac{3kz}{20C_t b^2} T, \tag{4.17}$$

où z est le nombre d'atomes par maille du cristal de Ni et C_t la vitesse du son transversale. À partir des équations 4.16 et 4.17, nous déduisons la relation correspondant aux graphiques 4.13 et 4.14 :

$$v = \frac{20C_t b^3}{3kz} \frac{\tau_{app}}{T}. \tag{4.18}$$

L'application numérique nous donne $v = 60,68\frac{\tau_{app}}{T}$ en excellent accord avec le coefficient de proportionnalité (exprimé par rapport aux graphiques 4.13 et 4.14 en Å.$K.ps^{-1}.MPa^{-1}$) obtenu par simulation pour la dislocation coin $v = 61,4\frac{\tau_{app}}{T}$. Dans le cas d'une dislocation vis, les simulations nous donnent $v = 43,14\frac{\tau_{app}}{T}$ et le modèle Leibfried sous-estime le coefficient de proportionnalité. Ramené sous forme de frottement effectif, nous obtenons pour la dislocation coin $B_c/T = 40,5$ nPa.s et pour la dislocation vis $B_v/T = 57,7$ nPa.s en bon accord avec les résultats de Bitzek et Gumbsch (2005). Olmsted et al. (2005) ont également calculé un coefficient B plus grand pour les segments vis que celui des segments

coin dans l'Al. Afin de pouvoir interpréter la différence de frottement entre les types de dislocation coin et vis, il est nécessaire d'utiliser un modèle plus complexe que le modèle proposé par Leibfried. Dans le cas de la diffraction des phonons par interaction anharmonique avec le cœur des dislocations, le traitement théorique proposé par Alshits (1992) fait apparaître une dépendance de B linéaire en température mais également inversement proportionnelle avec le rayon de cœur de la dislocation. Cette description est cohérente avec nos résultats du chapitre 2, pour lesquels nous avons calculé un étalement des cœurs des dislocations coin η_c plus grand que celui des dislocations vis η_v. En comparant le rapport des coefficients de frottements avec celui des étalements des cœurs de dislocation nous obtenons dans Ni : $B_c^{Ni}/B_v^{Ni} = 0,70$ et $\eta_v^{Ni}/\eta_c^{Ni} = 0,63$. Notons qu'un accord analogue est observé dans l'Al si nous utilisons les coefficients B calculés par Olmsted et al. (2005) pour $\frac{\tau_{app}}{T} \leq 0,3$ MPa/K utilisant le même potentiel interatomique d'Al. Nous obtenons numériquement $B_c^{Al}/B_v^{Al} = 0,52$ et $\eta_v^{Al}/\eta_c^{Al} = 0,55$.

Les figures 4.13 et 4.14 mettent également en évidence l'existence d'un régime de saturation pour lequel la vitesse de la dislocation tend vers une limite (différente selon le caractère de la dislocation). Cette évolution de la vitesse peut être décrite par un modèle relativiste. La vitesse de saturation calculée dans nos simulations correspond à une fraction de la vitesse du son transversale. Marian et Caro (2006) ont montré que cette vitesse de saturation peut être liée aux vitesses de phase des phonons se propageant dans la direction de glissement des dislocations. Nous notons enfin qu'il est possible dans certaines conditions d'accélérer les dislocations au-dessus de la vitesse de saturation comme l'ont montré par simulation Marian et Caro (2006), Tsuzuki et al. (2009).

Dans les simulations d'activation thermique du franchissement des obstacles, la vitesse des dislocations demeure dans le régime des basses contraintes des figures 4.13 et 4.14. Les vitesses des dislocations oscillant dans leur puits de potentiel sont petites par rapport à la vitesse de saturation et nous pouvons utiliser la relation linéaire liant le coefficient B à la température.

4.4 Variation de la fréquence d'attaque avec la contrainte

Suivant la description de l'activation thermique du franchissement du soluté par la dislocation, l'ajustement de l'équation 4.10 sur les temps d'attente $\bar{t}_a$ calculés par simulation nous permet de calculer la fréquence d'attaque effective ν_{eff}. Bien que la fréquence d'attaque soit largement dominée par le terme de Boltzmann à basse température, l'étude de ν_{eff} est intéressante car elle nous renseigne sur le mode de franchissement du soluté.
Les fréquences d'attaque sont reportées en fonction de la fraction de la contrainte critique appliquée sur les figures 4.15 pour la dislocation coin et 4.16 pour la dislocation vis. Nous observons que pour les deux types

de dislocations ν_{eff} augmente avec la contrainte. Les fréquences d'attaque calculées s'étalent sur une gamme allant de $\nu_D/140$ à $\nu_D/14$ avec $\nu_D = 7,8.10^{12}$ Hz la fréquence de Debye du Ni. Le franchissement d'un soluté par une dislocation présente donc une fréquence d'attaque inférieure aux processus de sauts atomiques telle que la diffusion des lacunes. Dans le cas des dislocations, l'expression de ν_{eff} est encore assez mal connue aujourd'hui. Bien que la TET considère en principe toutes les dimensions du système (Vineyard 1957), il est possible de se limiter en pratique aux plus pertinentes. Déterminer quelles dimensions et donc quels modes dominent dans le phénomène étudié représente une des principales difficultés de l'application de cette théorie. Nous comparons nos résultats avec deux types d'approches théoriques en fonction de la description des modes de vibration de la dislocation. La première approche considère classiquement les modes de vibration d'une dislocation vue comme une ligne élastique ancrée à ses extrémités (Friedel 1964, Granato et al. 1963). Dans la seconde approche, nous faisons l'analogie entre une dislocation et une particule dans un potentiel unidimensionnel (Kramers 1940).

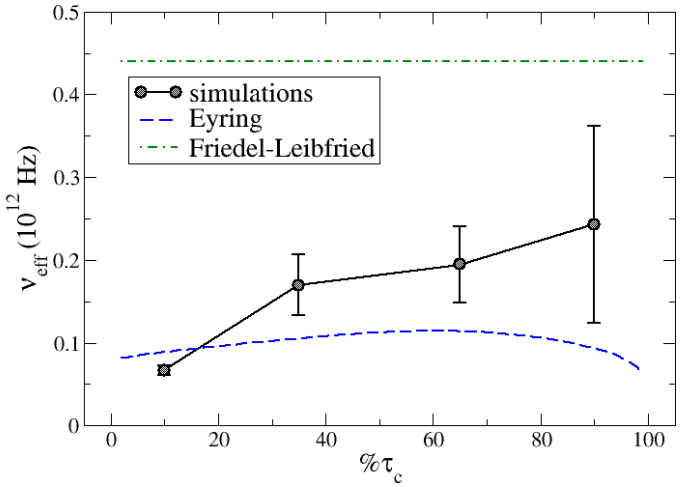


FIGURE 4.15 – *Fréquence d'attaque ν^c_{eff} du franchissement d'un atome d'aluminium par une dislocation coin dans le nickel en fonction de la fraction de la contrainte critique τ_c imposée au système. Les symboles représentent les résultats des simulations et les courbes les approches théoriques d'Eyring (trait discontinu) et de Friedel-Leibfried (trait pointillé discontinu).*

4.4.1 Modèle de Friedel-Leibfried

Friedel (1964) assimile la dislocation se libérant par activation thermique à une ligne élastique ancrée sur une chaîne d'obstacles espacés de façon équidistante. Il pose L_y la distance entre deux obstacles. Dans nos simulations, cette longueur correspond simplement à la longueur de la dislocation. Il attribue une masse par unité de longueur à la dislocation m_0* ainsi qu'une tension de ligne Γ_0 selon leurs estimations classiques via la théorie élastique (Friedel 1964). La plus petite fréquence propre correspond à l'inverse du temps nécessaire pour propager une onde à la vitesse

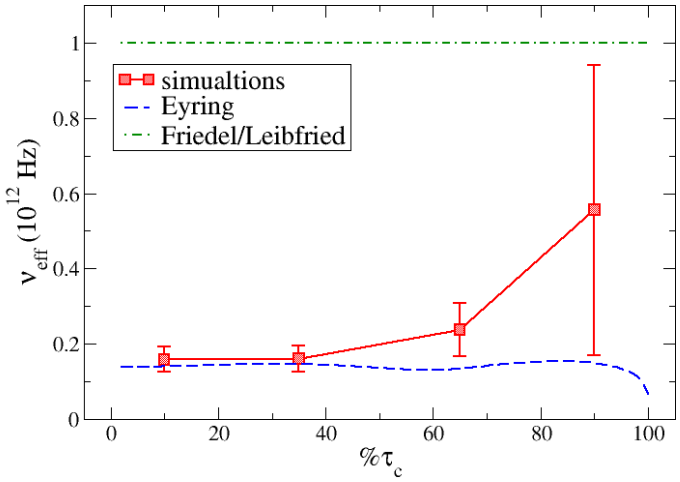


FIGURE 4.16 – *Même graphique que 4.15 pour une dislocation vis.*

du son le long de la ligne de dislocation. Friedel donne l'estimation de la fréquence d'attaque :

$$\nu_{eff} = \sqrt{\frac{2\Gamma}{\pi^2 m^*}} \frac{1}{L_y}. \tag{4.19}$$

Avec les estimations classiques de Γ_0 et m_0^* Friedel obtient :

$$\nu_{eff} = \frac{v_s}{L_y}, \tag{4.20}$$

où v_s est la vitesse du son dans le métal. Suivant une démarche similaire Leibfried (1956) calcule la fréquence naturelle d'une dislocation ancrée entre deux obstacles en y ajoutant l'effet d'une contrainte extérieure τ_{app}. Il considère dans son calcul un obstacle de largeur l que nous pouvons estimer dans notre système égale à un vecteur de Burgers. La fréquence d'attaque obtenue par Leibfried s'écrit alors :

$$\nu_{eff} = \sqrt{\frac{v_s^2}{L_y^2} + \frac{2\tau_{app} b}{\pi^2 \Gamma_0 L_y}}. \tag{4.21}$$

Cette expression est remarquable car elle fait apparaître un accroissement de fréquence ν_{eff} avec la contrainte appliquée. Toutefois, du fait de la faiblesse de τ_{app} dans le cas d'un obstacle constitué par un atome de soluté par rapport à la tension de ligne, le second terme du membre de droite est négligeable. L'équation 4.21 se réduit alors au modèle proposé par Friedel.

Pour mettre en œuvre le modèle de Friedel formulé par l'équation 4.19, nous utilisons les valeurs effectives de la masse et de la tension de ligne de nos simulations calculées précédemment. Nous obtenons numériquement $\nu_{eff}^c = 0,44.10^{12}$ Hz pour la dislocation coin et $\nu_{eff}^v = 1.10^{12}$ Hz pour la dislocation vis. Ces fréquences d'attaque sont indépendantes de la contrainte appliquée comme reporté sur les figures 4.15 et 4.16. La comparaison avec

nos résultats de simulation montre que les modèles de Friedel et Leibfried surestiment la fréquence d'attaque. Leur estimation s'améliore avec l'augmentation de la contrainte appliquée mais reste néanmoins deux fois supérieure à ν_{eff} pour une contrainte égale à 90% de la contrainte critique statique.

4.4.2 Modèle de Granato

Dans l'étude du franchissement d'un obstacle par une dislocation, Granato et al. (1963) ont appliqué la théorie de Vineyard (1957) qui fournit une expression explicite de l'entropie d'activation. Granato reprend cette approche en ne considérant que les degrés de liberté les plus pertinents associés aux vibrations du segment de dislocation de chaque côté de l'obstacle. Cette hypothèse réduit drastiquement la complexité du problème. Granato donne l'expression de la fréquence d'attaque comme :

$$\nu_{eff} = \frac{v_s\sqrt{H''(x_0)H''(x_s)}}{8e\mu}, \tag{4.22}$$

où $H''(x) = \partial^2 H(x)/\partial x^2$ est la rigidité de l'obstacle à la position x de la dislocation c'est-à-dire la dérivée de la force de l'obstacle par rapport à la position de la dislocation. Nous notons que, dans l'équation 4.22, la fréquence d'attaque ne dépend pas de la longueur du segment de la dislocation. La fréquence varie en revanche avec la contrainte appliquée via la variation de courbure de l'obstacle $H''(x)$. Afin d'estimer $H''(x)$, Granato utilise dans son calcul la relation force-distance linéaire par morceaux développée par Teutonico et al. (1961) pour décrire l'interaction entre un obstacle et une dislocation. Nous pouvons calculer la courbure directement en fonction de la contrainte à partir des paysages d'enthalpie des figures 4.9 et 4.10. En appliquant l'équation 4.22 et en faisant varier la contrainte, nous obtenons des fréquences d'attaque comprises entre $\nu^c_{eff} = 0,007.10^{12}$ Hz et $\nu^c_{eff} = 0,029.10^{12}$ Hz pour la dislocation coin et $\nu^v_{eff} = 0,003.10^{12}$ Hz et $\nu^v_{eff} = 0,016.10^{12}$ Hz pour la dislocation vis. En dépit de développements théoriques conséquents, l'estimation fournie par le modèle Granato est bien trop faible pour expliquer les fréquences d'attaque obtenues dans nos simulations. Elle sous-estime ces dernières d'un ordre de grandeur.

4.4.3 Modèle de Kramer unidimensionnel

Afin d'expliquer la fréquence d'attaque calculée dans nos simulations, nous faisons l'analogie entre une dislocation et une particule se déplaçant dans un potentiel unidimensionnel. Il s'agit d'une réduction importante des degrés de liberté du système où c'est la position de la dislocation qui impose le taux de franchissement de l'obstacle. Les variables rapides sont supposées suivre adiabatiquement la position de la dislocation (variable lente) et peuvent être éliminées du traitement théorique. Le potentiel dans lequel la dislocation évolue nous est donné en fonction de la contrainte par les paysages d'enthalpie des figures 4.7 et 4.8.
Le problème peut être analysé selon la théorie de Kramers (1940) qui distingue plusieurs régimes de sauts pour une particule en fonction de sa

masse m^*, de l'amortissement $B(T)$ et de la fréquence propre du puits de potentiel ν_{x0}. La fréquence harmonique est obtenue à partir du paysage d'énergie comme :

$$\nu_{x0} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{H''(x_0)}{m^* L_y}}. \tag{4.23}$$

Nous pouvons alors classer le problème du franchissement d'un soluté par une dislocation en fonction du rapport des temps caractéristiques de corrélation des vitesses $t_\lambda = B(T)/m^*$ et de celui de la période propre du puits de potentiel $t_{x0} = 1/\nu_{x0}$ (Gouyet 2001). Afin de tester les limites du régime de saut de la dislocation, nous choisissons une température pouvant aller jusqu'à $T = 0,05\Delta H/k$. Nous calculons numériquement le maximum du rapport des temps caractéristiques égal à $t_\lambda/t_{x0} \approx 0,5$ pour la dislocation coin et $t_\lambda/t_{x0} \approx 0,25$ pour la dislocation vis. Le régime du franchissement du soluté par une dislocation tombe donc dans la classe des régimes sous-amortis. De plus nous avons calculé la fréquence d'attaque pour des températures telles que $\Delta H \gg kT$. Nous pouvons donc estimer le préfacteur de l'équation 4.6 à partir de la théorie de la vitesse absolue de réaction d'Eyring. Dans le cadre de l'approximation harmonique unidimensionnelle ν_{eff} se réduit à ν_{x0} c'est-à-dire simplement à la fréquence harmonique du puits de potentiel.
Les résultats du calcul de ν_{x0} en fonction de la contrainte sont reportés sur les figures 4.15 et 4.16. Nous observons que la loi d'Eyring réduit au cas unidimensionnel fournit une valeur raisonnable de ν_{eff}. C'est de loin la meilleure estimation des modèles présentés dans cette section. Pour une dislocation vis à une faible contrainte appliquée, il est remarquable que ν_{eff} se réduise à ν_{x0}. Dans ce cas, il semble que ce soit ce mode de vibration qui permette à la dislocation de franchir la barrière d'énergie. En revanche, la fréquence du mode de vibration harmonique autour de la position stable ne peut expliquer l'augmentation de ν_{eff} avec l'augmentation de la contrainte appliquée. En effet, l'augmentation de la contrainte applatit le potentiel et, dans le cadre de l'approximation harmonique, ν_{x0} tend vers zéro pour des contraintes se rapprochant de τ_c.

Afin d'améliorer la compréhension de la variation de la fréquence d'attaque avec la contrainte appliquée, trois pistes peuvent être envisagées. La première est d'interpréter la fréquence effective calculée comme un mélange des modes d'une particule dans un potentiel unidimensionnel avec les modes de vibration d'une ligne élastique. Plus la contrainte augmente, plus la dislocation est poussée contre l'obstacle. Les modes pertinents de vibrations se retrouvent de plus en plus associés à ceux d'une ligne élastique ancrée rigidement en un point et ν_{eff} tend vers l'estimation de Friedel-Leibfried. La deuxième piste consiste à prolonger le calcul des modes d'une particule dans un potentiel unidimensionnel en sortant du cadre de l'approximation harmonique. Les effets anharmoniques peuvent expliquer l'augmentation de la fréquence d'attaque avec la diminution de la barrière d'énergie. La dernière piste consiste en un durcissement du potentiel $H(x)$ avec la contrainte appliquée qui ne peut pas être déduit de notre calcul de $H(x)$ à partir de l'équation 4.13. Pour calculer cette variation du potentiel sous contrainte par un calcul atomistique, il est né-

cessaire de mettre en œuvre des méthodes de recherche de cols d'énergie comme la méthode NEB ce qui a été réalisé par Rodney et Proville (2009) dans le cas des barrières de Peierls.

Nous notons finalement que l'activation thermique du franchissement d'un obstacle par une dislocation est un phénomène relativement simple. Le calcul d'une fréquence d'attaque effective dans une solution solide implique de prendre en compte plusieurs sites de franchissement et des obstacles qui comportent des barrières d'énergie différentes. Pour ce problème complexe, une réduction à un paysage d'énergie unidimensionnel n'est pas envisageable.

Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons étudié l'activation thermique du franchissement d'un atome de soluté d'Al par les dislocations vis et coin en mettant en œuvre des simulations de DM à contrainte constante. Nous calculons les temps d'attente nécessaires à la dislocation pour sauter l'obstacle. Les temps d'attente se distribuent selon une loi de probabilité exponentielle nous permettant d'estimer le nombre nécessaire d'échantillonnages et la précision du calcul du temps d'attente moyen pour une température et une contrainte données.
Le temps d'attente moyen diminue avec la contrainte appliquée et la température suivant un processus thermiquement activé. L'analyse des résultats de simulation dans le cadre de la TET montre que l'enthalpie d'activation diminue avec la contrainte appliquée. En revanche, la fréquence d'attaque augmente avec la contrainte appliquée.
À partir du paysage d'énergie interne ressenti par la dislocation cisaillant un soluté, la diminution de l'enthalpie d'activation est expliquée quantitativement par le travail de la contrainte appliquée. Les estimations des théories classiques, calculées en utilisant les paramètres physiques effectifs de nos simulations, ne permettent pas de reproduire les fréquences d'attaque simulées en DM. La meilleure estimation de la fréquence d'attaque est fournie par la fréquence harmonique du puits de potentiel unidimensionnel.
Le comportement des dislocations coin et vis en température est qualitativement similaire. Pour les deux types de dislocations, l'enthalpie d'activation diminue selon une loi empirique de Frost et Ashby. La fréquence d'attaque effective de la dislocation vis est environ deux fois supérieure à celle d'une dislocation coin.

À ce stade, la caractérisation de l'interaction élémentaire entre une dislocation et un soluté isolé est achevée. Nous pouvons désormais simuler le glissement d'une dislocation dans une solution solide et étudier les effets de l'interaction élémentaire dislocation-soluté isolé sur le comportement d'une dislocation interagissant avec une population d'atomes de soluté.

Durcissement par solution solide

5

Sommaire

5.1 Simulation du durcissement par solution solide 123
5.1.1 Calcul de la contrainte critique d'écoulement 123
5.1.2 Contrainte critique d'écoulement en fonction de la concentration 126
5.2 Analyse du durcissement par solution solide 128
5.2.1 Obstacles contribuant significativement au durcissement par solution solide 128
5.2.2 Comparaison entre approches théoriques et simulations . 132
5.2.3 Dissociation des dislocations en solution solide 136
5.3 Simulation de tension de ligne 139
5.3.1 Développement du modèle 139
5.3.2 Résultats du modèle de tension de ligne 149
Conclusion 151

Ce chapitre traite du DSS à proprement parler c'est-à-dire de l'interaction collective des atomes de soluté avec une dislocation. Nous souhaitons modéliser la contrainte d'écoulement d'une solution solide à partir des paramètres élémentaires d'interaction entre une dislocation et un obstacle isolé. Cette modélisation doit être réalisée pour les deux alliages modèles et les deux caractères de dislocation dans le but d'identifier les paramètres pertinents décrivant le DSS.

Pour cela, nous réalisons des simulations statiques de glissement d'une dislocation coin et vis dans une solution solide de Ni(Al) et Al(Mg). Nous étudions la variation de la contrainte d'écoulement en fonction de la concentration en atomes de soluté.
Les simulations atomistiques nous permettent d'étudier l'importance de l'ancrage des atomes de soluté en fonction de leur position. Nous comparons l'ancrage des dislocations produit par des solutés dans les plans contigus au plan de glissement à celui produit par des solutés éloignés du plan de glissement. Pour ce faire, nous calculons la contrainte critique résolue (CCR) de deux solutions solides modèles. La première solution

modèle ne contient des solutés que dans les plans contigus au plan de glissement de la dislocation, la seconde contient des solutés seulement en dehors de ces plans contigus.
Ces solutions solides modèles sont l'occasion de confronter les simulations aux prédictions des modèles analytiques de DSS pour lesquels les impuretés sont aléatoirement distribuées dans le plan de glissement. Afin de comparer les simulations avec les modèles analytiques, nous mettons en œuvre les théories du DSS en utilisant les paramètres d'interaction dislocation-soluté déterminés dans les chapitres précédents.
Nous construisons un modèle de tension de ligne (TL) qui nous permet de simuler explicitement l'interaction d'une dislocation dissociée avec une population d'obstacles de plusieurs natures. Le modèle est paramétré pour reproduire les caractéristiques physiques de l'interaction entre une dislocation et un obstacle pouvant être constitué par un ou deux atomes de soluté. Nous comparons finalement les résultats du modèle de TL avec ceux des simulations atomistiques pour une dislocation coin dans les deux alliages de Ni(Al) et Al(Mg).

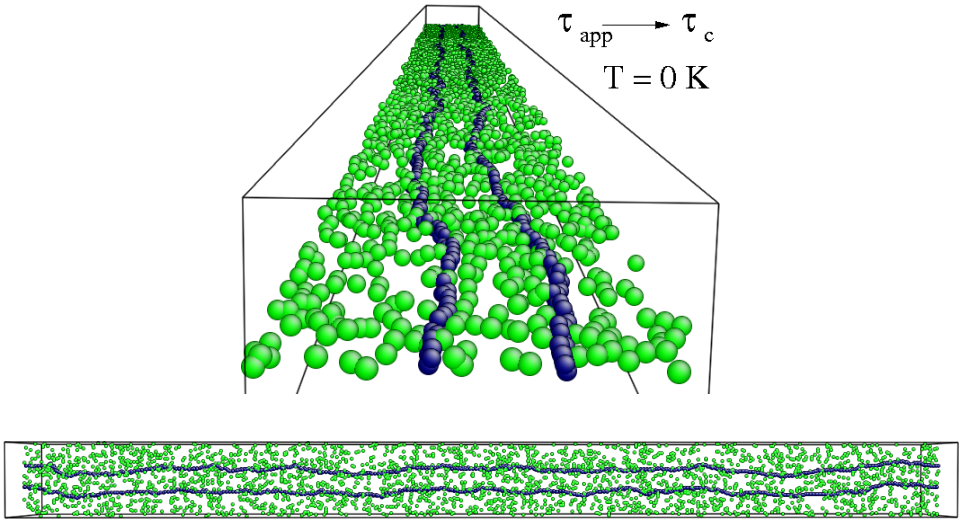


FIGURE 5.1 – *Images caractéristiques des simulations statiques décrites dans ce chapitre vues en perspective (dessus) et selon la direction perpendiculaire au plan de glissement (dessous). La contrainte imposée croît jusqu'à la contrainte critique. Les atomes représentés correspondent aux dislocations partielles (bleu foncé) ainsi qu'aux impuretés (vert clair) appartenant aux plans contigus au plan de glissement. La dislocation est ancrée par la population des atomes de soluté placés en solution solide. Seuls les atomes de soluté contenus dans les plans cristallins contigus au plan de glissement sont représentés.*

5.1 Simulation du durcissement par solution solide

5.1.1 Calcul de la contrainte critique d'écoulement

Afin de calculer la contrainte critique τ_c nécessaire pour déplacer une dislocation dans une solution solide, nous reproduisons la méthodologie développée par Proville et al. (2006) dans le cas d'une dislocation coin glissant dans une solution solide de Ni(Al). Cette démarche consiste à réaliser des simulations statiques similaires à celles mises en œuvre pour déterminer la force d'ancrage d'un obstacle isolé. Afin de reproduire la statistique d'interaction le long d'une ligne de dislocation, nous simulons des segments de dislocation étendus atteignant $L_y = 520b$ pour les dislocations coin et $L_y = 300b$ pour les dislocations vis. Ces longueurs nous permettent de calculer une valeur quasi asymptotique de la contrainte d'écoulement (cf. section B.1.2 page 189).
Une fois la dislocation introduite dans le cristal, nous substituons aléatoirement aux atomes de la matrice des atomes de soluté jusqu'à atteindre la concentration souhaitée. La distribution des atomes de soluté est parfaitement aléatoire et, à la fin du processus de substitution, la probabilité de rencontrer un atome de soluté sur un site atomique est égale à la concentration atomique en soluté c. Le paramètre de maille varie en fonction de la concentration en soluté suivant la loi de Vegard (cf. section A.2 page 178).
Après une première relaxation de l'énergie potentielle du système, nous appliquons une contrainte sur les surfaces du cristal par incrément de 4 MPa. Après chaque incrément de contrainte, l'enthalpie du système est relaxée jusqu'à ce que la dislocation rencontre une position stable ou glisse dans la solution solide jusqu'à une certaine distance de glissement. Lors du glissement de la dislocation, cette dernière traverse plusieurs fois la boîte de simulation du fait des conditions périodiques dans la direction de glissement. À chaque passage, la dislocation cisaille le cristal et décale d'un vecteur de Burgers les plans supérieurs par rapport aux plans inférieurs au plan de glissement créant ainsi une nouvelle distribution d'atomes de soluté. En outre, les positions prises par la dislocation dans la direction de glissement le long de la ligne de dislocation ne sont pas identiques à chaque passage à travers la boîte de simulation. Nous simulons par conséquent l'équivalent du glissement d'une dislocation dans une solution solide étendue dont la distribution des obstacles est aléatoire.

Pour un certain niveau de contrainte, la dislocation ne rencontre plus de configurations stables et glisse librement dans le cristal. C'est cette contrainte qui correspond au calcul de la contrainte critique d'écoulement τ_c. Son niveau dépend néanmoins de la distance parcourue par la dislocation comme reporté sur la figure 5.2 dans le cas d'une dislocation coin glissant dans une solution solide de Ni(Al). En effet, plus la dislocation parcourt une distance importante plus la probabilité de rencontrer une configuration ancrée augmente. Nous choisissons une distance de glissement minimale égale à 1000 Å. τ_c est la contrainte nécessaire pour faire glisser une dislocation sur cette distance. Dans un métal recuit, cette distance correspond à un dixième de la distance moyenne entre disloca-

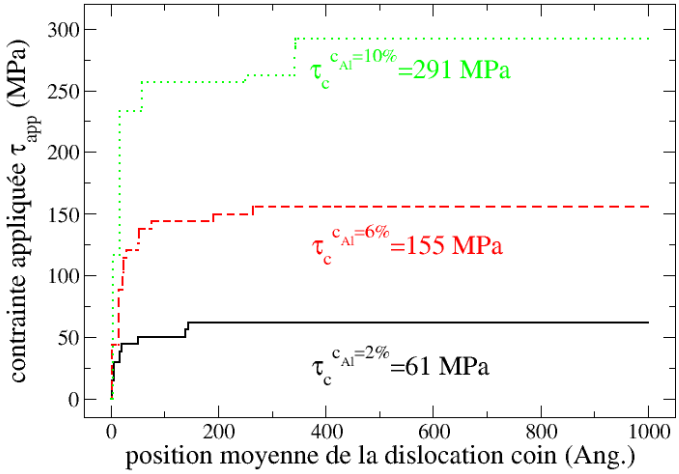


FIGURE 5.2 – *Contrainte appliquée τ_{app} en fonction de la distance parcourue x par une dislocation coin dans une solution solide de Ni(Al) pour plusieurs concentrations : $c_{Al} = 2\%, 6\%$ et 10%. Au cours de la simulation de relaxation la contrainte est incrémentée à chaque fois que la dislocation occupe une position stable. A partir d'une certaine distance de glissement la contrainte converge vers la contrainte critique τ_c suffisante pour que la dislocation glisse librement dans le cristal.*

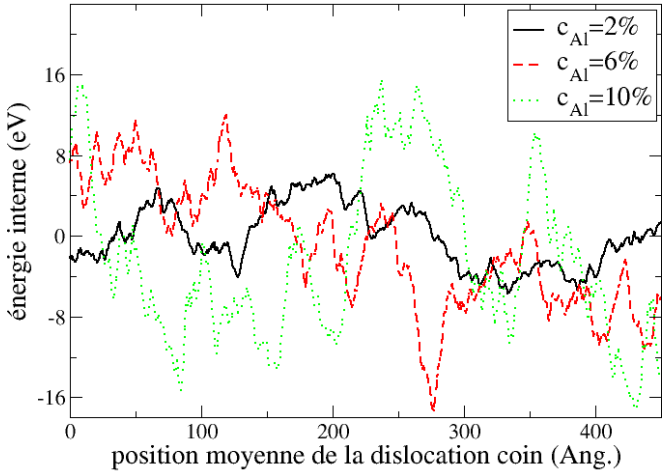


FIGURE 5.3 – *Énergie interne en fonction de la distance parcourue x par une dislocation coin dans une solution solide de Ni(Al) pour plusieurs concentrations : $c_{Al} = 2\%, 6\%$ et 10%. La simulation statique est réalisée à la contrainte critique τ_c suffisante pour que la dislocation glisse librement dans le cristal.*

tions. Comme reporté sur la figure 5.2, la contrainte appliquée augmente brusquement au début du glissement et atteint rapidement un plateau proche de la contrainte d'écoulement. En pratique, la contrainte ne croît presque plus au bout d'une distance de glissement égale à 500 Å équivalant à environ 5 longueurs de boîte de simulation. Nous notons que des trajectoires similaires à la figure 5.2 ont été obtenues par Arsenault et al. (1989a) dans des simulations de TL modélisant des cristaux nettement plus étendus dans la direction de glissement.

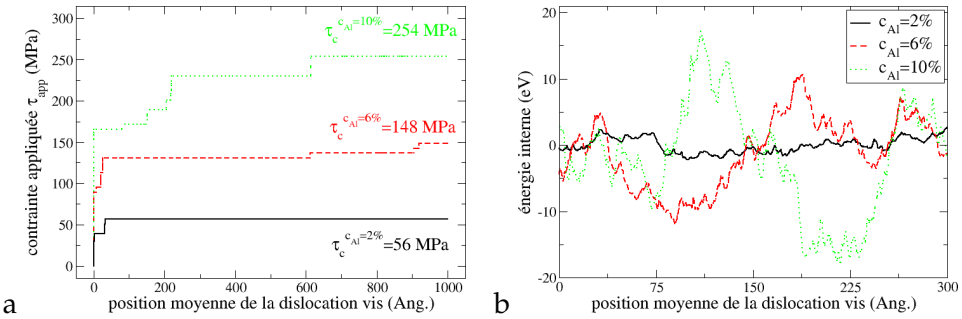


FIGURE 5.4 – *Mêmes graphiques que 5.2 (a) et 5.3 (b) pour une dislocation vis dans une solution solide de Ni(Al) pour plusieurs concentrations :* $c_{Al} = 2\%, 6\%$ *et* 10%.

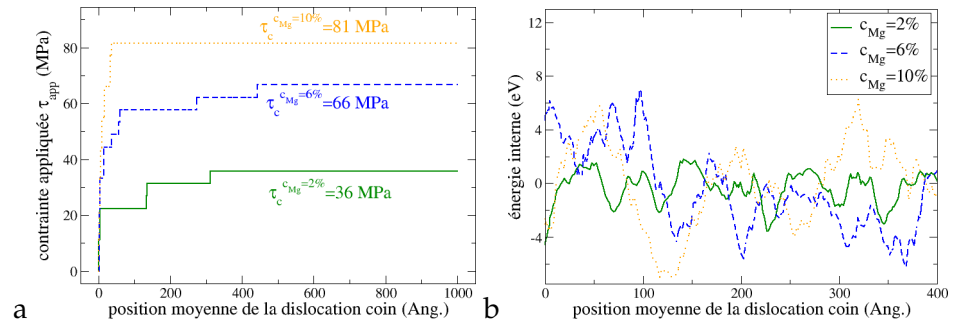


FIGURE 5.5 – *Mêmes graphiques que 5.2 (a) et 5.3 (b) pour une dislocation coin dans une solution solide de Al(Mg) pour plusieurs concentrations :* $c_{Mg} = 2\%, 6\%$ *et* 10%.

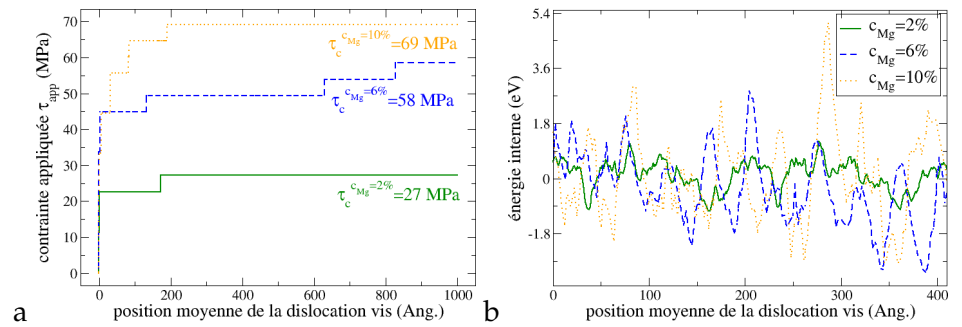


FIGURE 5.6 – *Mêmes graphiques que 5.2 (a) et 5.3 (b) pour une dislocation vis dans une solution solide de Al(Mg) pour plusieurs concentrations :* $c_{Mg} = 2\%, 6\%$ *et* 10%.

Nous réalisons des calculs de contrainte critique pour des concentrations atomiques de solutés allant de $c_s = 2\%$ à $c_s = 10\%$. La contrainte critique nécessaire pour faire glisser la dislocation augmente avec la concentration en atomes de soluté du fait de l'accroissement de la densité d'obstacles. Nous réalisons le calcul du paysage d'énergie interne par la

méthode de Langevin sur-amorti pour une contrainte correspondant à τ_c comme dans le cas d'un obstacle isolé. Le paysage d'énergie interne ainsi obtenu est reporté sur la figure 5.3 pour plusieurs concentrations en soluté dans le cas d'une dislocation coin glissant dans une solution solide de Ni(Al). L'amplitude du potentiel ressenti par la dislocation au cours de son glissement s'amplifie à mesure que la concentration augmente. Les barrières d'énergie sont plus difficilement franchissables ce qui se traduit par une augmentation de la contrainte d'écoulement. Nous réalisons les mêmes simulations pour les dislocations coin et vis dans les deux alliages de Ni(Al) et Al(Mg) dont des exemples de trajectoires et de paysages d'énergie interne sont reportés sur les figures 5.4, 5.5 et 5.6. Ces différents systèmes suivent qualitativement le même comportement.

5.1.2 Contrainte critique d'écoulement en fonction de la concentration

Nous étudions la variation de la contrainte d'écoulement des deux solutions solides modèles en fonction de la concentration en soluté. Contrairement aux calculs statiques d'interaction entre une dislocation et un obstacle isolé nous donnant τ_c de manière déterministe, les simulations de DSS nécessitent plusieurs réalisations. En effet le calcul de τ_c dépend de la configuration particulière des obstacles distribués aléatoirement dans le cristal. Pour chaque concentration, τ_c est calculée à partir d'une moyenne de cinq réalisations.

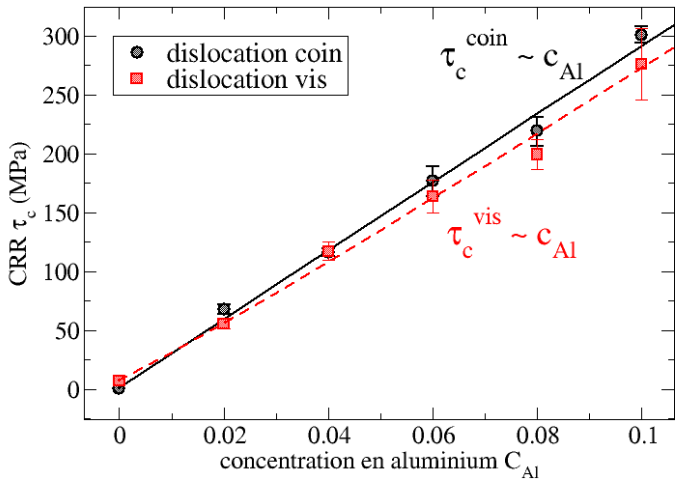


FIGURE 5.7 – *Contrainte critique résolue de glissement τ_c pour une dislocation coin (cercles) et vis (carrés) dans une solution solide de Ni(Al) en fonction de la concentration en aluminium c_{Al}. Les courbes correspondent aux ajustements des données de simulations suivant les tendances reportées sur le graphique.*

Les contraintes critiques d'écoulement sont reportées pour les dislocations coin et vis dans les deux solutions solides de Ni(Al) et Al(Mg) sur les figures 5.7 et 5.8. Nous observons un durcissement plus important dans l'alliage de Ni(Al) pour lequel la contrainte maximale d'une solution

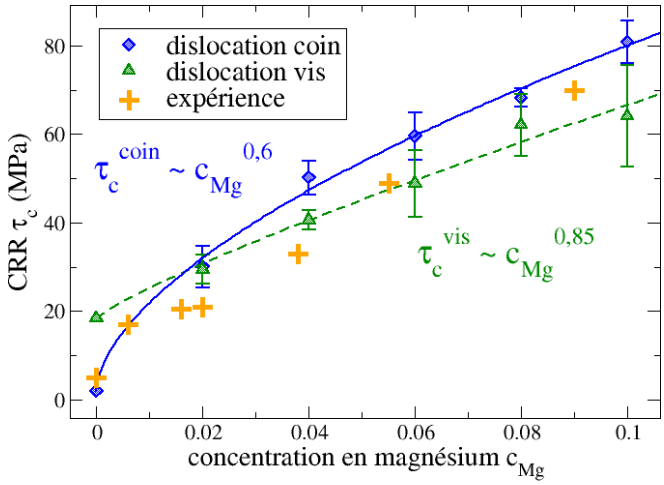


FIGURE 5.8 – *Contrainte critique résolue de glissement τ_c pour une dislocation coin (losanges) et vis (triangles) dans une solution solide d'Al(Mg) en fonction de la concentration en magnésium c_{Mg}. Les courbes représentent les ajustements des données de simulations suivant les tendances reportées sur le graphique. Les données expérimentales (croix) correspondent à l'extrapolation à température nulle des contraintes critiques mesurées sur des monocristaux par Podkyuko et Pustovalov (1978).*

solide contenant 10% d'Al vaut $\tau_c \approx 300$ MPa. Dans l'alliage d'Al(Mg), la contrainte maximale calculée à la même concentration nous donne $\tau_c \approx 80$ MPa. En utilisant les contraintes de Peierls τ_p calculées dans le chapitre 2, nous ajustons l'équation phénoménologique $\tau_c = \tau_p + Ac_s^r$ sur les contraintes d'écoulement calculées en fonction de la concentration en solutés c_s. Le résultat des ajustements, nous fournissant l'exposant r, est représenté sur les figures 5.7 et 5.8. L'alliage de Ni(Al) montre une dépendance quasi-linéaire de τ_c avec la concentration et $r \approx 1$ pour les deux types de dislocations. Dans l'alliage d'Al(Mg), nous calculons $r \approx 2/3$ pour la dislocation coin et $r \approx 4/5$ pour la dislocation vis.

La comparaison des contraintes critiques de glissement calculées par simulation atomistique pour les deux types de dislocations montre que les ancrages des segments de dislocation coin et vis sont du même ordre de grandeur. Dans l'alliage de Ni(Al), les courbes de durcissement de la figure 5.7 correspondant aux deux dislocations sont presque superposées. Dans la solution solide d'Al(Mg), les segments de dislocation vis durcissent légèrement moins que les segments de caractère coin comme reporté sur la figure 5.8. Même si nous retranchons la contrainte de Peierls pour ne garder que l'effet des solutés, la contrainte τ_c de la dislocation vis est au minimum deux fois inférieure à τ_c de la dislocation coin. Il s'agit d'un résultat remarquable car il montre que les dislocations vis subissent une interaction non négligeable de la solution solide. Leur ancrage par les atomes de soluté est comparable avec celui des dislocations coin. Ce résultat explique notamment que, contrairement aux métaux CC, la microstructure observée expérimentalement des solutions solides CFC est isotrope avec une proportion de dislocation coin et vis équivalente (Argon

2007). Il souligne de plus la nécessité de prendre en compte la contrainte d'écoulement des dislocations vis en vue d'une description complète du DSS.

La comparaison des exposants r calculés dans nos simulations et ceux mesurés expérimentalement montre un accord qualitatif pour les deux alliages simulés. Dans l'alliage de Ni(Al) Mishima et al. (1986) ont observé une dépendance linéaire de la limite d'élasticité dans des essais de compression à la température de l'azote liquide. Zhao (2001), Cahn (2001) ont réalisé des expériences de nano-indentation pour lesquelles ils observent une dépendance linéaire de la dureté avec la concentration de la solution solide. En utilisant la loi empirique de Tabor (1951), reliant linéairement la dureté à la limite d'écoulement, il est possible de déduire des expériences de Zhao (2001), Cahn (2001) une dépendance également linéaire de τ_c avec la concentration dans Ni(Al).
Concernant l'alliage d'Al(Mg), des expériences ont été menées par Podkyuko et Pustovalov (1978) sur des monocristaux jusqu'à une température cryogénique. L'extrapolation à une température nulle des limites d'écoulement observées expérimentalement sont reportées sur la figure 5.8. Ces valeurs expérimentales nous permettent une première comparaison avec les simulations de relaxations statiques. À partir des données extrapolées de Podkyuko et Pustovalov (1978), nous calculons un exposant $r = 0,84$. Nous observons que la valeur de la limite d'écoulement en fonction de la concentration est proche de celle calculée dans nos simulations. Il faut toutefois garder à l'esprit qu'il ne peut s'agir que d'une comparaison qualitative du fait des effets de taille finie de nos simulations (cf. section B.1 page 183). En effet, l'aire balayée par les dislocations est plus petite dans notre système que dans les expériences ce qui change la statistique d'interaction avec la solution solide. D'autre part, à cause du volume réduit des simulations, la tension de ligne des dislocations dans les expériences est plus grande que la tension de ligne effective de la dislocation dans nos simulations. Pour comparer de manière plus rigoureuse les simulations aux expériences, il faut pouvoir prendre en compte ces effets statistiques et de tension de ligne ce qui passe par le développement d'un modèle.

5.2 Analyse du durcissement par solution solide

Afin d'identifier les obstacles participant significativement au DSS, nous réalisons des simulations statiques de glissement de dislocation dans des solutions solides modèles ne contenant des atomes de soluté que dans certains plans cristallins. Ces solutions solides modèles sont schématisées sur la figure 5.9. Le cas des solutions solides ne contenant des atomes de soluté que dans les plans contigus au plan de glissement nous permet de tester les modèles analytiques du DSS.

5.2.1 Obstacles contribuant significativement au durcissement par solution solide

Nous calculons la contrainte critique de glissement des solutions solides modèles schématisées sur les figures 5.9 (b) et (c) suivant la même

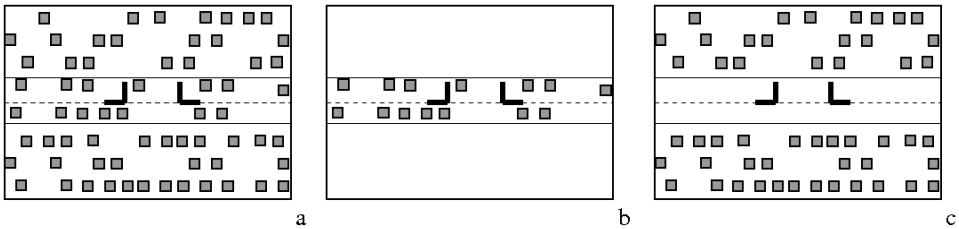


FIGURE 5.9 – *Schéma des différents systèmes simulés : a) solution solide complète, b) solution solide dans deux plans contigus au plan de glissement et c) hors des deux plans contigus au plan de glissement. Les symboles carrés représentent les atomes de soluté distribués aléatoirement. La concentration en soluté dans les plans remplis est la même que celle de la solution solide complète correspondante.*

méthodologie que celle utilisée pour les solutions solides complètes (figure 5.9 (a)). Les solutions solides modèles contiennent soit des solutés distribués uniquement dans les plans contigus au plan de glissement (figure 5.9 (b)) soit des solutés distribués en dehors des plans contigus au plan de glissement (figure 5.9 (c)). Afin d'écarter l'effet de la contrainte de Peierls τ_p, nous la soustrayons à la contrainte critique calculée τ_c pour obtenir le durcissement dû aux seuls atomes de soluté :

$$\Delta\tau_c = \tau_c - \tau_p. \tag{5.1}$$

Nous calculons les contraintes d'écoulement pour les deux solutions solides modèles avec des solutés dans les plans contigus au plan de glissement nous donnant la contrainte $\Delta\tau_{dans}$ et en dehors des plans contigus au plan de glissement nous donnant la contrainte $\Delta\tau_{hors}$. Les résultats des simulations sont reportés sur les figures 5.10 et 5.11 respectivement pour les dislocations coin et vis dans l'alliage de Ni(Al). Pour l'alliage d'Al(Mg), la figure 5.12 correspond à la dislocation coin et la figure 5.13 représente les contraintes critiques calculées pour une dislocation vis. À partir de ces figures, il est clair que la majorité de la contrainte d'écoulement calculée pour une solution solide provient des obstacles situés dans les plans contigus au plan de glissement en accord avec la description de Fleischer et Hibbard (1963). Ce résultat est cohérent avec les calculs de forces d'ancrage réalisés dans les chapitres précédents pour lesquels nous avions constaté une rapide décroissance de la force d'ancrage avec l'éloignement des atomes de soluté du plan de glissement. $\Delta\tau_{dans}$ est égale à $\approx 80\%$ de τ_c de la solution solide complète quand $\Delta\tau_{hors}$ ne représente que $\approx 20\%$ de τ_c. Cette tendance est observée dans les quatre systèmes simulés. En accord avec les théories analytiques, il paraît donc raisonnable de simplifier le problème du DSS en ne considérant que les obstacles formés par les atomes de soluté situés dans les plans contigus au plan de glissement. En revanche, comme les interactions les plus importantes sont produites par des solutés situés au voisinage immédiat du plan de glissement, il n'est pas légitime d'utiliser la théorie élastique linéaire pour décrire le DSS.

Il est également utile de comprendre comment se compose la contrainte d'écoulement d'une solution solide complète à partir des ancrages produits par les obstacles proches et éloignés du plan de glissement. Nous testons différentes lois de mélange pour calculer la contrainte

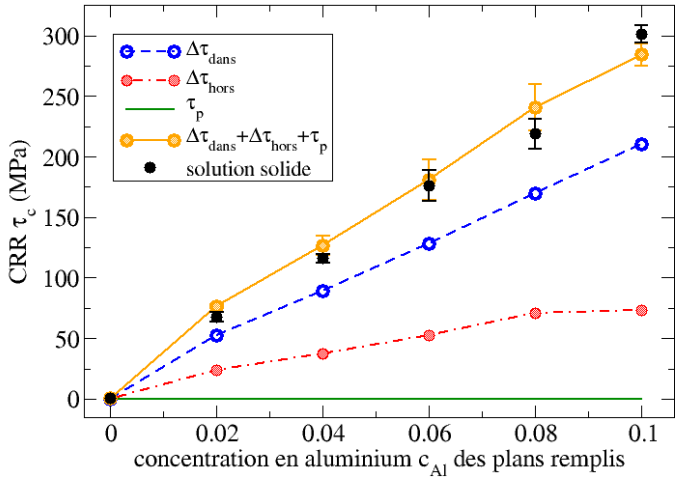


FIGURE 5.10 – *Contrainte critique résolue de glissement τ_c pour une dislocation coin dans les différentes solutions solides simulées de Ni(Al) en fonction de la concentration en aluminium c_{Al}. Pour les solutions solides ne contenant des solutés que dans et hors des deux plans contigus au plan de glissement, la concentration correspond à la concentration des plans atomiques contenant des atomes d'aluminium. La contrainte critique d'une solution solide complète est reproduite par la somme des autres contraintes.*

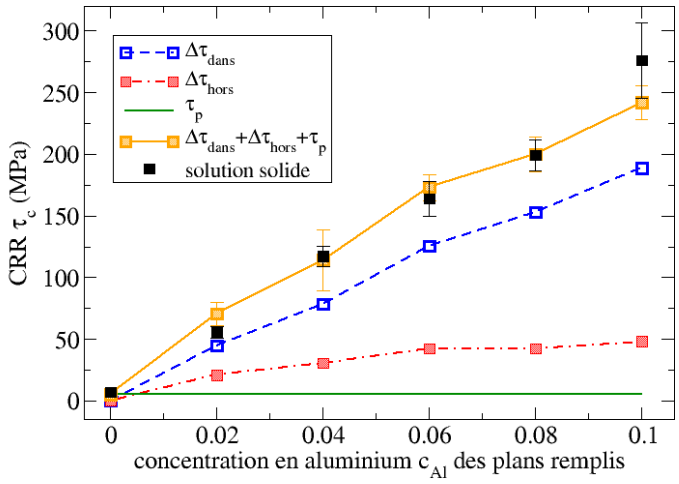


FIGURE 5.11 – *Idem que 5.10 pour une dislocation vis.*

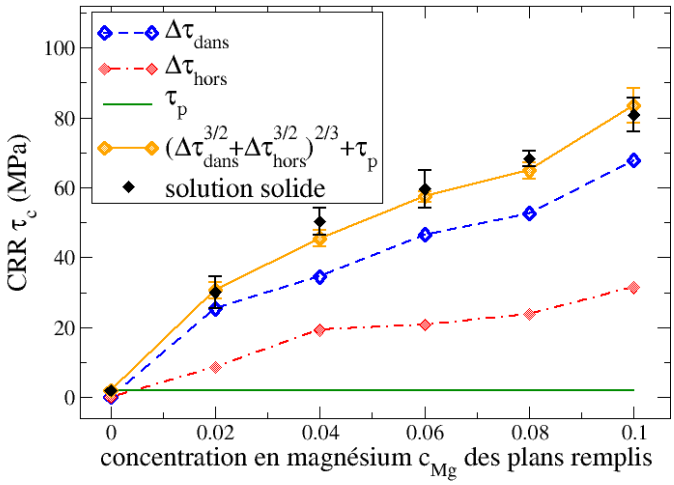


FIGURE 5.12 – *Idem que 5.10 pour une dislocation coin dans les différentes solutions solides simulées d'Al(Mg). La contrainte critique d'une solution solide complète est reproduite par une loi de mélange proposée par Labusch (1970).*

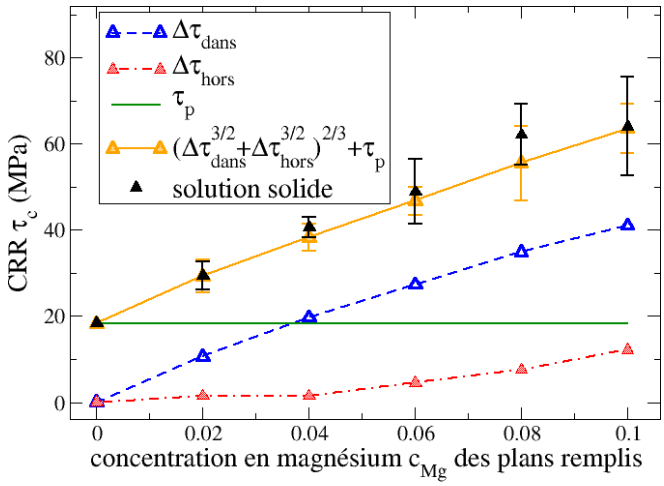


FIGURE 5.13 – *Idem que 5.12 pour une dislocation vis.*

d'écoulement d'une solution solide à partir des solutions solides modèles ne contenant des solutés que dans et hors des plans contigus au plan de glissement. Dans notre système, les lois de mélange peuvent s'écrire sous la forme générale suivante :

$$\tau_c = (\Delta\tau_{dans}^n + \Delta\tau_{hors}^n)^{1/n} + \tau_p. \tag{5.2}$$

Hiratani et Bulatov (2004) et Terentyev et al. (2008) ont par exemple utilisé une loi de type pythagorienne avec $n = 2$ pour mélanger les durcissements provenant d'obstacles de différentes natures. Dans les deux alliages simulés dans cette étude, une loi de mélange pythagorienne ne permet pas de reproduire la contrainte d'écoulement de la solution solide complète. Pour reproduire cette contrainte dans le cas de la solution solide de Ni(Al), nous utilisons une somme directe avec $n = 1$. En revanche, une loi de mélange proposée par Labusch (1970) avec $n = 3/2$ décrit correctement τ_c d'une solution solide d'Al(Mg) pour les deux types de dislocations. Cette loi de mélange a été invoquée par Gypen et Deruyttere (1977a;b), Bako et al. (2007) pour reproduire la CCR de matériaux contenant des obstacles de natures différentes. Les lois de mélange proposées sont reportées sur les figures 5.10, 5.11, 5.12 et 5.13. Nous concluons empiriquement que l'exposant des lois de mélange correspond à l'inverse de l'exposant de la concentration pour le problème du DSS suivant la relation $n = 1/r$.

5.2.2 Comparaison entre approches théoriques et simulations

Le calcul de la contrainte d'écoulement pour une solution solide modèle ne contenant des atomes de soluté que dans les plans contigus au plan de glissement reproduit le cadre théorique des modèles analytiques du DSS présenté dans le chapitre 1 (cf. section 1.2.1 page 29). Cette configuration nous permet de comparer simulation et théorie. En effet les modèles analytiques de DSS ne prennent en compte que les obstacles les plus significatifs situés dans le plan de glissement. D'autre part, ils supposent une distribution parfaitement aléatoire des impuretés ce qui est le cas dans nos simulations. Nous pouvons donc comparer $\Delta\tau_{dans}$ à ses différentes estimations théoriques calculées sans paramètres ajustables à partir des forces d'obstacle f_m, des portées d'interaction w et de la tension de ligne Γ déterminées dans les chapitres précédents.
Bien que ces théories analytiques de DSS aient été développées à la base pour les dislocations coin, il n'existe pas d'argument théorique qui nous empêche de les utiliser pour les dislocations vis à condition d'être capable de donner les paramètres d'entrée du modèle.

Nous devons adapter les modèles à notre système particulier de solution solide CFC où les dislocations sont dissociées en dislocations partielles. Comme les modèles s'appliquent à une dislocation non dissociée, nous faisons l'hypothèse de dislocations partielles rigidement liées. D'autre part, la formule finale des différents modèles est en général dérivée pour un réseau carré lequel suppose une surface atomique dans le plan de glissement égale à b^2 avec b le vecteur de Burgers de la dislocation. Dans notre système, cette quantité doit être changée pour $s = b^2\sqrt{3}/2$, c'est-à-dire pour la surface atomique des plans de glissement (111) des

dislocations dans les métaux CFC.
Les modèles analytiques considèrent un seul type d'obstacle. Or, comme nous l'avons étudié dans le chapitre 3, il existe quatre interactions possibles entre une dislocation et un atome de soluté isolé en fonction de sa position et de la dislocation partielle avec laquelle il interagit. Afin de comparer de manière cohérente les prédictions des modèles à nos simulations de DSS, les paramètres des modèles sont déterminés à partir des moyennes des coefficients d'interaction des atomes isolés (cf. tableaux B.1 et B.2 page 194). Nous obtenons une force d'obstacle moyenne $\bar{f}_m = \sum_i^4 f_{mi}/4$ correspondant à la force d'ancrage d'un atome de soluté isolé dans un des plans (111) les plus proches du plan de glissement. Nous calculons également la portée d'interaction typique $\bar{w} = \sum_i^4 w_i/4$ comme une moyenne des portées des solutés isolés.
La concentration effective en obstacles correspond à $4c$, où c est la concentration atomique en atomes de soluté, pour prendre en compte les différentes configurations d'obstacles c'est-à-dire au-dessus et au-dessous du plan de glissement pour les dislocations partielles de tête et de queue. Dans le modèle MNL, les obstacles au-dessus et au-dessous du plan de glissement sont déjà pris en compte. Dans ce cas particulier nous devons remplacer c par $2c$.
Dans une solution solide, la dislocation se courbe aléatoirement dans le cristal et il n'est pas possible de calculer la tension de ligne d'une dislocation comme dans les matrices de métal pur. Cependant nous pouvons supposer que Γ varie comme le module de cisaillement suivant l'expression classique pour la tension de ligne $\Gamma_0 = 0.5\mu b^2$ donnée par Nabarro (1967). La prise en compte de cette variation dans l'application des modèles ne change pas significativement la valeur de la CCR.

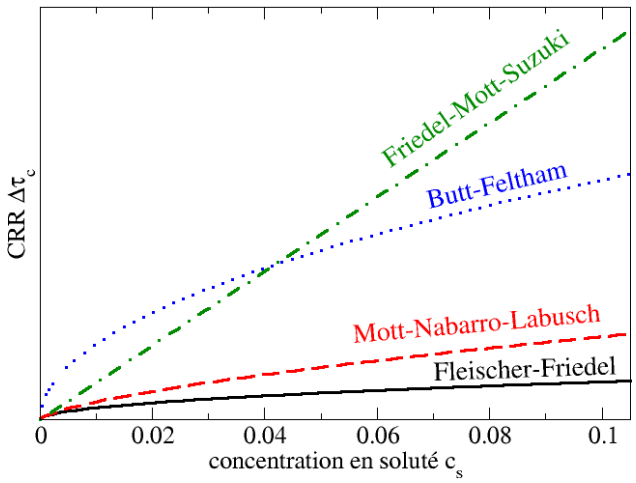


FIGURE 5.14 – *Contrainte critique résolue de glissement $\Delta\tau_c$ d'une dislocation dans une solution solide en fonction de la concentration en atomes de soluté calculée par les théories analytiques de DSS. Les courbes correspondent au modèle de Fleischer-Friedel, Mott-Nabarro-Labusch, Butt-Feltham et Friedel-Mott-Suzuki pour un jeu de paramètres donné : $\bar{f}_m$, $\bar{w}_m$ et Γ.*

Nous calculons la CCR en fonction de la concentration en solutés à partir des équations 1.3, 1.4, 1.5 et 1.6 des quatre modèles de DSS décrits dans le chapitre 1. Pour un jeu de paramètres d'interaction dislocation-soluté donné, nous traçons sur la figure 5.14 la contrainte d'écoulement en fonction de la concentration en atomes de soluté. Ce graphique est caractéristique des prédictions des modèles de DSS pour les paramètres d'interaction dislocation-obstacle que nous avons calculés. Pour les deux types de dislocations et dans les deux alliages, le modèle de FF prédit la plus petite contrainte d'écoulement, suivi du modèle MNL, puis du modèle FMS et du modèle BF. En raison du taux de durcissement (exposant r), il existe un croisement entre la limite d'écoulement décrite par le modèle de FMS et le modèle BF lequel devient plus petit pour les hautes concentrations en solutés. La concentration où se croisent ces deux modèles dépend des paramètres d'interaction entre dislocation et soluté. Pour les deux alliages et les deux types de dislocations, le modèle de BF surestime la CCR alors que la théorie FF la sous-estime systématiquement. Foreman et Makin ont montré que la théorie FF surestime d'environ 10% la CCR d'un réseau d'obstacles ponctuels distribués de manière parfaitement aléatoire (Kocks 1969). L'écart entre le modèle FF et les résultats de nos simulations ne peut pas être compensé par une telle correction. Il serait intéressant d'étudier des concentrations en solutés moins importantes pour lesquelles le modèle de FF est supposé plus pertinent mais les effets de taille finie limitent cette étude.

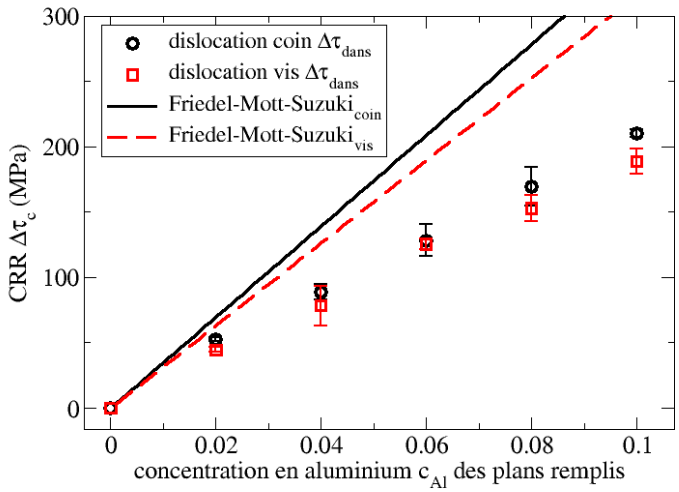


FIGURE 5.15 – *Contrainte critique résolue de glissement $\Delta\tau_c$ pour une dislocation coin (cercles) et vis (carrés) dans une solution solide de Ni(Al) en fonction de la concentration en aluminium c_{Al}. La solution solide ne contient des atomes de soluté que dans les plans contigus au plan de glissement. Les courbes correspondent au modèle de Friedel-Mott-Suzuki dont les paramètres ont été calculés dans les chapitres précédents.*

Sur les graphiques 5.15 et 5.16 nous comparons les contraintes critiques calculées dans les simulations des solutions solides modèles ne contenant des atomes que dans le plan de glissement $\Delta\tau_{dans}$ aux prédictions des modèles théoriques. Nous choisissons de représenter sur ces graphiques

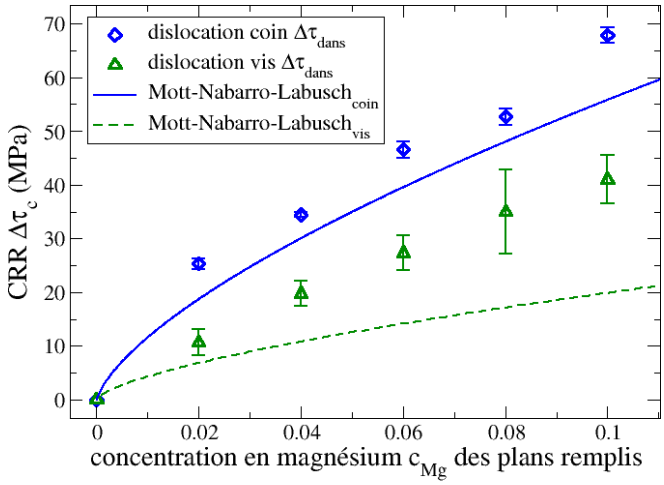


FIGURE 5.16 – *Contrainte critique résolue de glissement $\Delta\tau_c$ pour une dislocation coin (losanges) et vis (triangles) dans une solution solide de Al(Mg) en fonction de la concentration en magnésium c_{Mg}. La solution solide ne contient des atomes de soluté que dans les plans contigus au plan de glissement. Les courbes correspondent au modèle de Mott-Nabarro-Labusch dont les paramètres ont été calculés dans les chapitres précédents.*

uniquement les modèles donnant la meilleure description de $\Delta\tau_{dans}$ calculée dans les simulations. Il s'agit dans Ni(Al) du modèle de FMS et du modèle de MNL dans Al(Mg). Nous observons un accord qualitatif entre les résultats de simulations et les prédictions des modèles.
Dans la solution solide de Ni(Al), il est remarquable que la dépendance de $\Delta\tau_{dans}$ soit plus proche d'une dépendance linéaire avec la concentration qu'une loi en puissance fractionnaire. L'hypothèse d'une forme en zigzag du modèle de FMS est également plus raisonnable au regard des profils de dislocations observés dans les simulations. En revanche, le modèle de FMS prévoit une diminution de l'amplitude des zigzags quand les simulations montrent qu'elle augmente avec la concentration en atomes de soluté.
Dans Al(Mg), le modèle de MNL offre une bonne description de la contrainte d'écoulement de la dislocation coin. Ce résultat est en accord avec les expériences réalisées dans Al(Mg) par Schlagowski et al. (1988) qui utilisent la théorie MNL pour interpréter la distance inter-obstacle effective observée. En revanche la CCR de la dislocation vis est sous-estimée particulièrement à haute concentration du fait d'un exposant de la concentration r supérieur à la théorie MNL. Il est intéressant de noter que le modèle MNL est communément considéré comme fournissant une bonne description du durcissement des solutions solides concentrées. Si elles fournissent une description correcte dans Al(Mg), pour l'alliage de Ni(Al) nos simulations contrastent avec ce point de vue. Cependant, comme pour le modèle de FF, il n'est pas exclu qu'un accord puisse être retrouvé entre théorie et simulation à plus basse concentration.
Labusch (1972) a proposé un critère pour classer le DSS selon deux limites d'interaction entre dislocation et obstacle en fonction d'un paramètre adi-

mensionnel s'écrivant :

$$\beta = \frac{\bar{f}_m}{\Gamma} \frac{s}{b\bar{w}4c_s}. \tag{5.3}$$

Ce facteur de Labusch s'exprime comme le produit du rapport force d'obstacle-tension de ligne par le rapport densité d'obstacles-portée d'interaction. Une valeur élevée de β correspond au problème d'une ligne élastique en interaction avec des obstacles forts et ponctuels. Au contraire, quand β tend vers zéro les obstacles sont faibles et ancrent collectivement la dislocation laquelle reste quasiment droite dans la solution solide. Le premier cas correspond à la description du modèle théorique FMS adapté à Ni(Al), le second cas à la description du modèle théorique MNL plus proche de Al(Mg). Toutefois, l'application numérique nous donne $0,025 \lesssim \beta \lesssim 0,1$ dans les deux alliages et ne nous permet pas d'identifier un changement de régime en fonction des solutions solides et des caractères de dislocation.

La comparaison entre la contrainte d'écoulement calculée dans les simulations et celle calculée à partir des modèles théoriques sans paramètres ajustables montre qu'il est nécessaire de changer de modèle en fonction de l'alliage considéré. Dans le Ni(Al), la meilleure description théorique est donnée par le modèle de FMS lequel surestime la CCR. Dans la solution solide d'Al(Mg), c'est la théorie de MNL qui reproduit le mieux les données de simulation mais sous-estime ces dernières. Nous nous retrouvons donc dans la même position que les études du DSS précédentes où nous choisissons à postériori le modèle adéquat sans pouvoir justifier ce choix, ce qui n'est pas satisfaisant.
Pour améliorer le transfert de l'échelle atomique à l'échelle continue, la modélisation du DSS doit être approfondie. Il est nécessaire de tester la prise en compte de la dissociation des dislocations ainsi que la nature des différents types d'obstacles. En effet les dislocations partielles sont moins rigides que la dislocation totale. D'autre part, la variation de la distance de dissociation peut être également invoquée pour expliquer une source d'ancrage supplémentaire. Enfin, nous avons vu que les forces des paires de solutés peuvent être égales à la superposition des forces de deux atomes de soluté isolés. En revanche, les modèles analytiques traitent les paires de solutés par une répartition uniforme de deux solutés isolés. Pour pouvoir expliquer quantitativement la différence de statistique du DSS des deux alliages, il convient de tester ces différentes pistes. Pour ce faire, nous développons dans la section 5.3 un modèle de TL basé sur les calculs atomistiques.

5.2.3 Dissociation des dislocations en solution solide

Avant de modéliser une dislocation dissociée dans un modèle de TL, il nous faut déterminer les caractéristiques de cette dissociation via nos simulations atomistiques. Nous étudions donc le couplage entre les deux dislocations partielles dans les différentes solutions solides modèles de la figure 5.9.

Dans le chapitre 2, nous avons modélisé le couplage entre les dislocations partielles dans une matrice pure en considérant l'interaction entre les dislocations partielles, les dislocations images et le ruban de faute d'empilement. Nous utilisons la même approche pour une solution solide en étendant l'équation 2.7 développée précédemment pour le cas d'un alliage. Dans une solution solide, les constantes élastiques et l'énergie de faute d'empilement varient avec la concentration. D'autre part, la contrainte d'Escaig est nulle dans les simulations permettant le calcul de la contrainte d'écoulement d'une dislocation en solution. À partir de l'équation 2.7 développée dans le chapitre 2, la distance de dissociation s'écrit alors en fonction de la concentration comme :

$$d(c_s) = \frac{L_x}{\pi} \arctan\left(\frac{K(c_s)\pi}{L_x \gamma(c_s)}\right), \tag{5.4}$$

où $K(c_s)$ est un coefficient dépendant des constantes élastiques défini dans le chapitre 2 et $\gamma(c_s)$ l'énergie de faute d'empilement. Tous deux dépendent de la concentration en atomes de soluté. Comme nous connaissons la variation du module de cisaillement avec la concentration, nous pouvons calculer $K(c_s)$. En revanche, pour pouvoir mettre en œuvre l'équation 5.4 et comparer $d(c_s)$ à la distance de dissociation simulée, nous devons calculer la variation de l'énergie de faute d'empilement en fonction de la concentration.

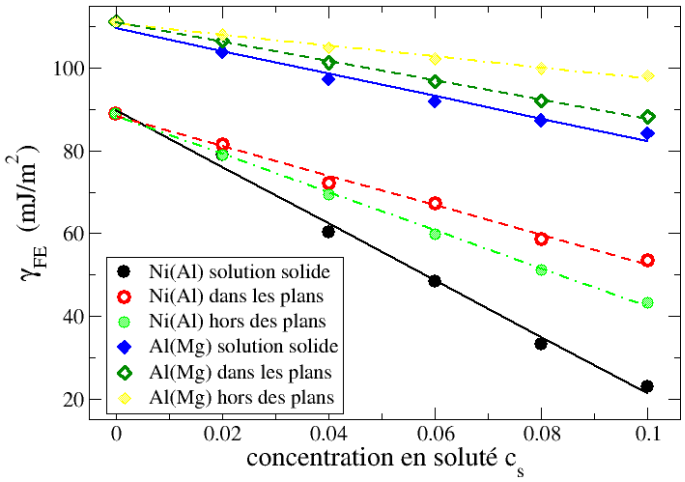


FIGURE 5.17 – *Énergie de faute d'empilement γ_{FE} en fonction de la concentration en soluté c_s dans l'alliage de Ni(Al) (cercles) et Al(Mg) (losanges). Les symboles correspondent aux résultats des simulations pour les différents types de solutions solides simulées : complète (symboles pleins), dans (symboles ouverts) et hors (symboles avec motifs) des deux plans contigus au plan de glissement. Les courbes représentent les ajustements linéaires des données de simulation.*

Pour calculer $\gamma(c_s)$, nous réalisons le même calcul que dans le chapitre 2 pour calculer γ_0 dans une matrice pure. Nous calculons la différence d'énergie potentielle par unité de surface d'un cristal avec ou sans faute d'empilement mais cette fois à une concentration d'alliage donnée. Nous

distribuons aléatoirement les atomes de soluté suivant les trois configurations des solutions solides modèles schématisées sur la figure 5.9. Les calculs de $\gamma(c_s)$ dans Ni(Al) et Al(Mg) pour les solutions solides complètes, les solutions solides modèles ne contenant des solutés que dans et hors des plans contigus au plan de glissement sont reportés sur la figure 5.17. Dans tous les systèmes nous observons une décroissance de l'énergie de faute d'empilement avec la concentration en atomes de soluté. La valeur de la variation de $\gamma(c_s)$ s'explique par le profil d'enthalpie de ségrégation des solutés sur le ruban de faute d'empilement présenté sur la figure 3.3. Ce résultat est cohérent avec les observations expérimentales des alliages CFC pour lesquels il a été observé une diminution de l'énergie de faute d'empilement avec la concentration en solutés (Vassamillet et Massalski 1963, Liu et Gallagher 1971). Siegel (2005) a obtenu également une tendance similaire pour des alliages de Ni par des calculs atomistiques de surface γ utilisant la méthode DFT.

Avant de passer à la comparaison entre modèle et simulation, nous remarquons que $K(c_s)$ ne varie pas de la même manière en fonction de la concentration pour les solutions solides modèles. Une solution solide complète contient une proportion de solutés plus importante qu'une solution solide modèle ne contenant des atomes qu'au voisinage du plan de glissement. En première approximation nous posons $K(c_s) = K(0)$ pour les solutions solides ne contenant des atomes de soluté que dans les plans contigus au plan de glissement. Pour les solutions solides contenant des atomes de soluté uniquement en dehors des plans contigus au plan de glissement, nous utilisons les coefficients élastiques de la solution solide complète $K(c_s)$.

Nous pouvons désormais calculer la distance de dissociation en fonction de la concentration à partir de l'équation 5.4 et la comparer à la distance de dissociation simulée. Comme dans le chapitre 2, nous choisissons d'ajuster le coefficient d'élasticité comme $K(0) \rightarrow AK(0)$ pour reproduire la distance de dissociation $d(0)$ à une concentration nulle. Le calcul de la distance de dissociation des simulations atomistiques est obtenu en calculant la distance de dissociation moyenne le long de la ligne de la dislocation sur les cinq réalisations simulées par concentration. Les résultats des simulations atomistiques sont comparés avec ceux de l'équation 5.4 sur les figures 5.18 et 5.19 respectivement pour les dislocations coin et vis. Nous observons un accord qualitatif entre les simulations et modèles de dissociation des dislocations partielles. Cet accord est meilleur dans le cas d'une solution solide complète pour laquelle nous avons utilisé les constantes élastiques effectives de la solution solide.
L'effet de la concentration d'alliage sur la distance de dissociation dépend de la variation des constantes élastiques et de la variation de l'énergie de faute d'empilement. La diminution de l'énergie de faute d'empilement augmente la dissociation du fait d'un coût énergétique moindre lors de la création d'une surface de ruban de faute d'empilement. Inversement, la diminution des constantes élastiques réduit la répulsion élastique entre les dislocations partielles. C'est la compétition entre ces deux tendances qui explique que dans les simulations atomistiques nous observons une

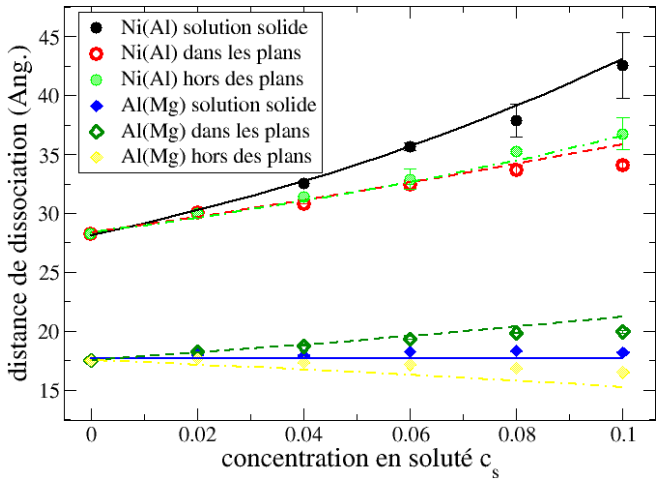


FIGURE 5.18 – *Distance de dissociation d d'une dislocation coin en fonction de la concentration en solutés c_s dans l'alliage de Ni(Al) (cercles) et Al(Mg) (losanges). Les symboles correspondent aux résultats des simulations pour les différents types de solutions solides simulées : complète (symboles pleins), dans (symboles ouverts) et hors (symboles avec motifs) des deux plans contigus au plan de glissement. Les courbes correspondent à la modélisation de l'équation 5.4 prenant en compte la variation de l'énergie de faute d'empilement.*

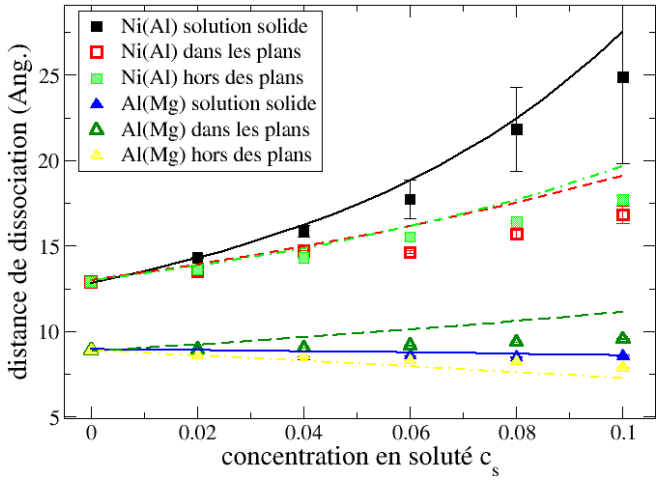


FIGURE 5.19 – *Même graphique que 5.18 pour une dislocation vis dans l'alliage de Ni(Al) (carrés) et Al(Mg) (triangles).*

augmentation ou une diminution de la distance de dissociation en fonction du système considéré. Il est remarquable que ce modèle simple puisse décrire la dissociation des dislocations partielles dans une solution solide, c'est ce qui justifie son emploi dans la modélisation en TL du DSS.

5.3 Simulation de tension de ligne

5.3.1 Développement du modèle

Afin de tendre vers une description quantitative du DSS, nous développons un modèle numérique de TL permettant de s'affranchir de certaines des hypothèses des modèles analytiques de champs moyens. Contrairement aux approches précédentes développées par Foreman et Makin (1966), Kocks et al. (1975), Arsenault et al. (1989a), nous souhaitons utiliser dans le modèle de TL uniquement des paramètres d'entrée basés sur les simulations atomistiques. Ce modèle doit prendre en compte la dissociation des dislocations et la nature différente des obstacles rencontrés par la dislocation. Il requiert de décrire tous les paramètres physiques caractérisant l'interaction dislocation dissociée-obstacle en traitant explicitement chaque dislocation partielle.

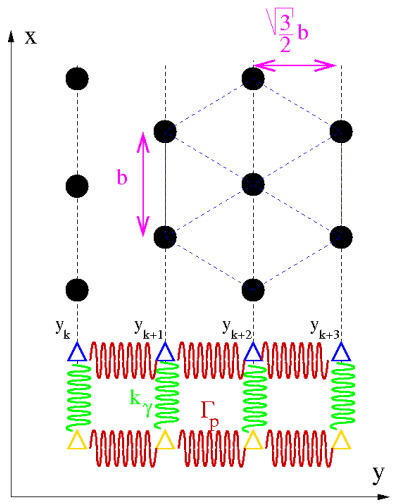


Figure 5.20 – *Schéma de principe des simulations de tension de ligne. La dislocation coin dissociée est modélisée comme deux lignes élastiques couplées de raideur constante. La dislocation interagit avec les obstacles distribués sur un réseau discret hexagonal reproduisant le plan de glissement (111) d'un métal cubique à faces centrées.*

Le schéma de principe des simulations du modèle de TL est reporté sur la figure 5.20. Les dislocations partielles sont modélisées comme des lignes élastiques possédant une rigidité constante et un couplage local avec l'autre dislocation partielle. En calculant la somme des forces par unité de longueur dl agissant sur une dislocation partielle, la forme continue de l'équation d'équilibre s'écrit dans cette approximation :

$$\Gamma_p \frac{\partial^2 x}{\partial y^2} + F_\gamma(d) - \frac{1}{dl}\frac{\partial W(x,y)}{\partial x} + \tau_{app} b_p = 0, \tag{5.5}$$

où nous reconnaissons le terme de tension de ligne d'une dislocation partielle Γ_p dans l'approximation harmonique, la force de couplage entre dis-

location partielle $F_\gamma(d)$, la force provenant du potentiel d'interaction avec les obstacles $W(x,y)$ et la force appliquée à la dislocation via la contrainte. La force de Peach-Kohler est ici $\tau_{app}b/2$ car le vecteur de Burgers à prendre en considération est celui d'une dislocation partielle $b_p = b/2$. $W(x,y)$ est la somme des potentiels d'interaction dislocation-obstacles $V(x,y)$ lesquels sont distribués sur un réseau discret hexagonal reproduisant le plan de glissement $(1\bar{1}1)$ d'un métal CFC. La force de couplage F_d des dislocations partielles peut être déduite du calcul de la distance de dissociation d'équilibre d_0 que nous avons précédemment réalisé en prenant en compte les forces images et la variation des constantes physiques avec la concentration. En reprenant la dérivation aboutissant aux équations 2.7 et 5.4 pour une distance de dissociation d différente de la distance d'équilibre, la force de couplage s'écrit :

$$F_\gamma(d) = \pm\gamma(c_s) - \left[\pm\frac{\pi AK(c_s)}{L_x}\cot\left(\frac{\pi d}{L_x}\right)\right], \tag{5.6}$$

où A est la constante d'ajustement permettant de reproduire la distance de dissociation d'une dislocation dissociée obtenue par les calculs atomistiques dans une matrice pure en l'absence de contrainte appliquée. Les signes $\pm$ dans l'équation 5.6 dépendent de la dislocation partielle considérée. Le signe positif (négatif) correspond à la dislocation partielle de queue (tête) qui est poussée (tirée) dans la direction de glissement. Nous développons $F_\gamma(d)$ au premier ordre autour de la position d'équilibre d_0 pour obtenir une expression linéaire de la force de couplage en $(d - d_0)$:

$$F_\gamma(d) \approx -\left[\pm\frac{\pi AK(c_s)}{L_x^2\sin^2(\frac{\pi d_0}{L_x})}\right](d - d_0). \tag{5.7}$$

Nous en déduisons la constante de raideur k_γ du couplage entre les dislocations partielles du modèle de TL représenté sur la figure 5.20 :

$$k_\gamma = \frac{\pi AK(c_s)}{L_x^2\sin^2(\frac{\pi d_0}{L_x})}. \tag{5.8}$$

Pour pouvoir résoudre numériquement les équations 5.5 et 5.8, les dislocations partielles sont traitées comme des lignes élastiques discrétisées en segments de longueur $b\sqrt{3}/2$ correspondant à la distance inter-rangée atomique. Nous supposons que l'ensemble des forces est reporté sur les nœuds des dislocations partielles discrétisées. Nous faisons également l'hypothèse que les obstacles interagissent uniquement avec les nœuds des dislocations situés sur les mêmes rangées. Si le potentiel d'interaction dislocation-obstacle est constant sur la largeur inter-nœud $b\sqrt{3}/2$ le long de la ligne élastique, il se réduit à $V(x,y) = V(x)$. À partir de la discrétisation des équations 5.5 et 5.8, nous écrivons l'équation de Langevin sur-amorti qui nous permet de calculer la position d'équilibre de la dislocation partielle de tête :

$$\lambda\dot{x}_k^t = \frac{\sqrt{3}b\Gamma_p}{2}\Delta_k x_k^t + k_\gamma(x_k^t - x_k^q - d) - \sum_i \frac{\partial V_j^t(x - x_{k,i})}{\partial x} + \frac{\sqrt{3}b^2}{4}\tau_{app}, \tag{5.9}$$

et de la dislocation partielle de queue :

$$\lambda \dot{x}_k^q = \frac{\sqrt{3}b\Gamma_p}{2}\Delta_k x_k^q - k_\gamma(x_k^t - x_k^q - d) - \sum_i \frac{\partial V_j^q(x - x_{k,i})}{\partial x} + \frac{\sqrt{3}b^2}{4}\tau_{app}, \tag{5.10}$$

où λ est le coefficient de frottement de Langevin, x_k est le kième nœud le long de la ligne de la dislocation, Δ_k est le Laplacien discrétisé et $x_{k,i}$ est la position du ième obstacle sur la rangée k. Les interactions $V_j^t(x)$ et $V_j^q(x)$ des obstacles de type j correspondent respectivement aux potentiels d'interaction des partielles de tête et de queue. Les obstacles constitués d'atomes isolés sont notés j=1 et les obstacles constitués de paires de solutés sont notés j=2.

Pour pouvoir mettre en œuvre ce modèle, il est nécessaire de connaître la tension de ligne des dislocations partielles Γ_p. Elle diffère de la tension de ligne effective d'une dislocation parfaite calculée dans le chapitre 2 et dépend du couplage avec l'autre dislocation partielle. En outre, nous ne disposons pas d'expression analytique des potentiels d'interaction $V(x)$ car, comme nous l'avons vu dans le chapitre 3, la théorie élastique n'est pas valide pour décrire l'interaction obstacle-dislocation dans le plan de glissement. Au total, ce sont par conséquent les trois paramètres A, Γ_p et $V(x)$ qu'il nous faut ajuster sur les simulations atomistiques. Dans la suite de cette section, nous calculons ces paramètres à partir de configurations mettant en jeu une dislocation dissociée et un obstacle isolé.

Étant donné la complexité du modèle, nous nous restreignons aux dislocations de caractère coin des alliages de Ni(Al) et Al(Mg) pour lesquels nous ne prenons en compte que les atomes de soluté situés dans les plans contigus au plan de glissement. En effet nous avons montré précédemment qu'un tel système (dislocation coin dans une solution solide modèle) était suffisant pour reproduire la majorité de la contrainte d'écoulement ainsi que la différence de statistique existant entre les deux alliages.

Tension de ligne

La tension de ligne effective calculée dans le chapitre 2 intègre la rigidité de chacune des dislocations partielles ainsi que leur interaction. Nous pouvons donc nous attendre à ce que la tension de ligne d'une dislocation partielle Γ_p soit plus faible que la tension de ligne d'une dislocation coin parfaite Γ_c.
Pour calculer Γ_p, nous faisons interagir une dislocation coin avec un obstacle incisaillable en suivant la méthodologie décrite dans le chapitre 2. Dans les simulations atomistiques, l'obstacle est constitué en gelant la position de deux atomes premiers voisins de part et d'autre du plan de glissement. Dans les simulations de TL nous gelons la position d'un nœud d'une des dislocations partielles. Cette configuration d'obstacle nous permet d'étudier des courbures de dislocation importantes pour des valeurs élevées de contrainte appliquée, inférieures à la contrainte d'Orowan, sans que l'obstacle ne soit franchi par la dislocation. L'ajustement est réalisé pour des niveaux de contrainte de l'ordre des contraintes

d'écoulement des solutions solides modèles $\Delta\tau_{dans}$ à une concentration de 10% en atomes de soluté que nous cherchons à modéliser.

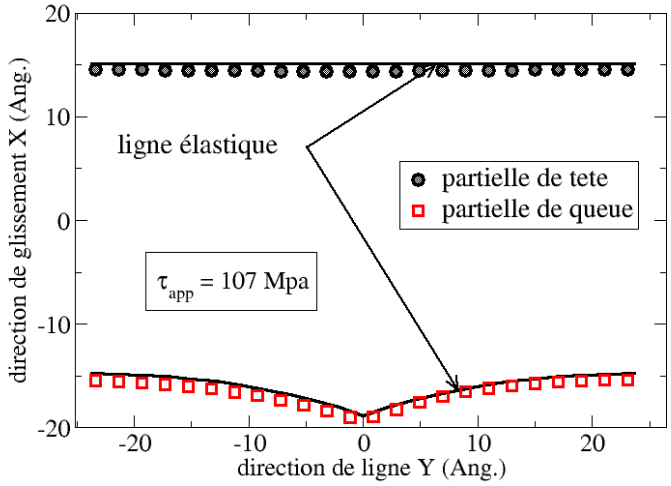


FIGURE 5.21 – *Dislocation coin dans le nickel ancrée sur obstacle incisaillable soumise à une contrainte τ_{app}. Les courbes correspondent au modèle de TL ajusté sur les données de simulation des dislocations partielles de tête (symboles pleins) et de queue (symboles ouverts).*

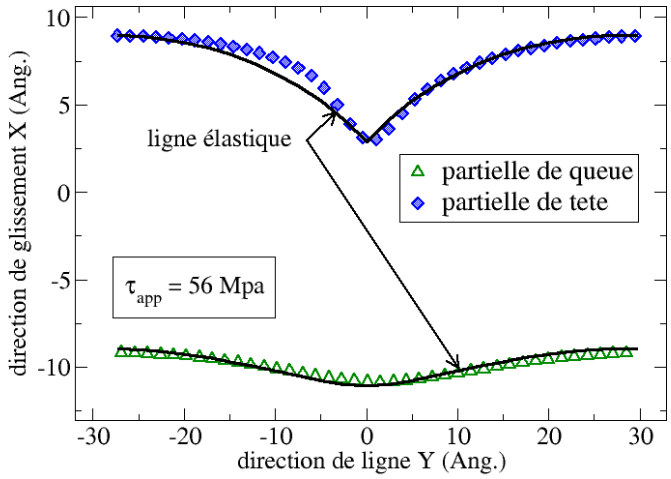


FIGURE 5.22 – *Même graphique que 5.21 pour une dislocation coin dans l'Al.*

Deux exemples de comparaison entre simulations atomistiques et modèle de TL d'une dislocation ancrée sur un obstacle sont reportés pour une dislocation coin sur les figures 5.21 et 5.22 respectivement dans le Ni et l'Al. Ces configurations nous permettent d'ajuster la tension de ligne des dislocations partielles Γ_p. Les figures 5.21 et 5.22 montrent que le modèle de TL reproduit de manière très satisfaisante les courbures des dislocations partielles ancrées obtenues dans les simulations atomistiques.

Le couplage des dislocations partielles plus important dans l'Al peut être observé sur la figure 5.22. En effet, alors que c'est la partielle de tête qui ancrée, la partielle de queue se courbe également.
En supposant que les dislocations partielles de tête et de queue possèdent la même tension de ligne, nous calculons $\Gamma_p^{Ni} = 0,07\Gamma_0$ dans Ni et $\Gamma_p^{Al} = 0,06\Gamma_0$ dans Al avec $\Gamma_0 = 0.5\mu b^2$ l'estimation classique donnée par Nabarro (1967). Il est intéressant de comparer la tension de ligne entre des dislocations partielles Γ_p à celle des dislocations coin parfaites Γ_c calculées au chapitre 2. Nous calculons pour les dislocations coin dans le Ni $\Gamma_c^{Ni}/\Gamma_p^{Ni} = 4,7$ et dans l'Al $\Gamma_c^{Al}/\Gamma_p^{Al} = 3,4$. Les dislocations partielles sont par conséquent nettement plus souples que les dislocations parfaites ce qui démontre la contribution du couplage entre les dislocations partielles à la rigidité de l'ensemble de la dislocation dissociée.

Distance de dissociation

Lors de l'interaction avec l'obstacle, la distance de dissociation évolue sous l'effet de l'ancrage de la dislocation. Sur la figure 5.21, nous observons un accroissement de la dissociation moyenne entre les dislocations partielles et inversement pour la figure et 5.22. Nous pouvons valider la modélisation du couplage entre dislocations partielles en calculant la dissociation moyenne d'une dislocation ancrée contre un obstacle. Deux possibilités existent, soit c'est la dislocation partielle de tête qui est ancrée et la distance de dissociation moyenne diminue, soit l'obstacle se situe dans le ruban de faute d'empilement et l'augmentation de la contrainte appliquée accroît la distance de dissociation moyenne.

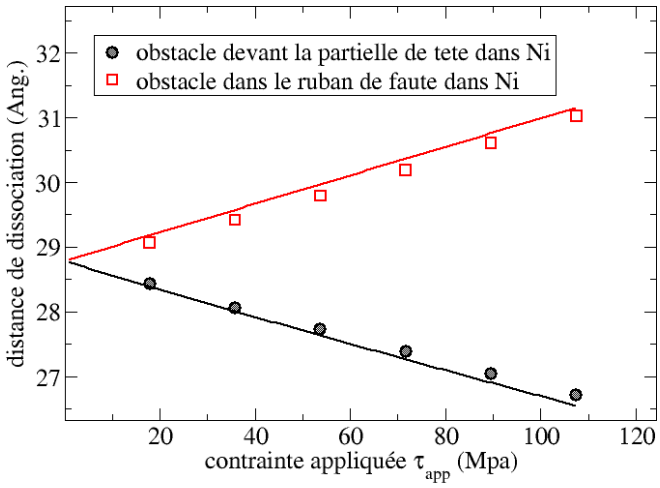


FIGURE 5.23 – *Distance moyenne de dissociation d'une dislocation coin dans le Ni ancrée sur un obstacle incisaillable en fonction de la contrainte appliquée τ_{app}. Les courbes correspondent au modèle de TL et les symboles représentent les données de simulations atomistiques pour une dislocation ancrée par sa partielle de tête (symboles pleins) et ancrée par sa partielle de queue (symboles ouverts).*

Les comparaisons entre simulation atomistique et modèle de TL d'une

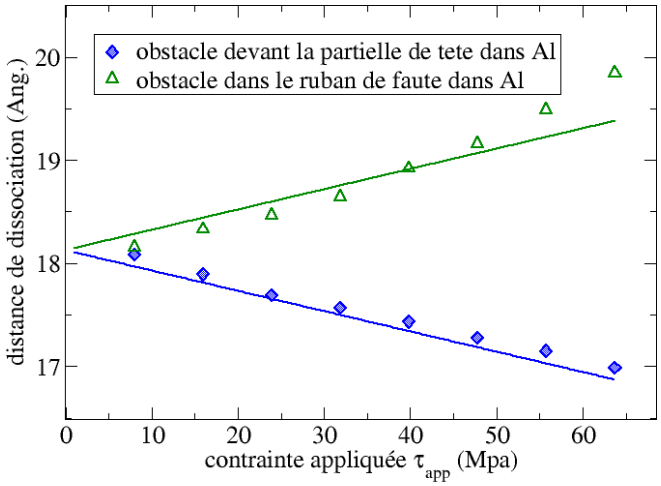


FIGURE 5.24 – *Même graphique que 5.23 pour une dislocation coin dans l'Al.*

dislocation coin ancrée sur un obstacle sont reportées sur les figures 5.23 et 5.24 respectivement dans le Ni et dans l'Al. Nous observons un accord très satisfaisant entre la dissociation moyenne calculée par le modèle de TL et celle obtenue dans les simulations atomistiques. Dans la matrice d'Al pour la configuration où les dislocations partielles s'écartent, cet accord devient plus qualitatif pour des contraintes élevées du fait d'une anharmonicité du couplage plus importante.

Potentiel d'interaction des atomes de soluté isolés

Le dernier paramètre à ajuster est le potentiel d'interaction $V(x)$ résultant de l'interaction entre les dislocations partielles et un obstacle. La procédure d'ajustement est plus complexe que dans les cas précédents car pour pouvoir être comparée aux simulations atomistiques elle requiert le calcul de l'énergie interne $U(x)$ en fonction de la position de la dislocation x. Il faut, de plus, différencier ce potentiel pour la dislocation partielle de tête $V^t(x)$ et pour la dislocation partielle de queue $V^q(x)$. Enfin $V(x)$ varie avec la nature de l'obstacle étudié : soluté isolé, paire de solutés au-dessus et au-dessous du plan de glissement.

L'énergie interne $U(x)$ au cours de l'interaction dislocation-obstacle nous est fournie par les calculs atomistiques du chapitre 3 lors du calcul de la portée d'interaction obstacle-dislocation (cf. figure 3.20 page 93). Pour ajuster $V(x)$ sur ce paysage d'énergie interne, nous prenons en compte les contributions énergétiques dues à la variation de la longueur des lignes et à celle de la distance de dissociation des dislocations partielles. Si nous plaçons i obstacles de nature j sur les sites $x_{k,i}$ dans la direction de glisse-

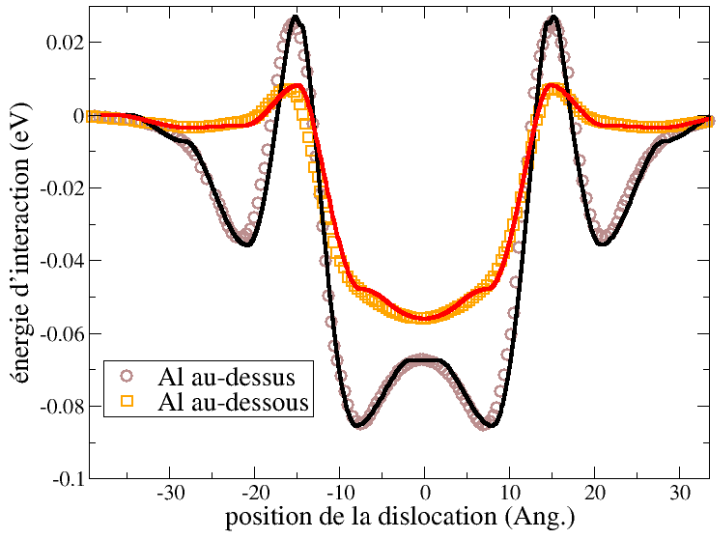


FIGURE 5.25 – *Énergie potentielle interne en fonction de la position moyenne d'une dislocation coin dans le nickel franchissant un atome d'aluminium situé sur le plan soit au-dessus (cercles) soit au-dessous (carrés) du plan de glissement. Les obstacles correspondent aux figures 3.7 (a) et (b). Les courbes continues correspondent aux calculs de TL ajustés sur les résultats de simulations atomistiques (symboles).*

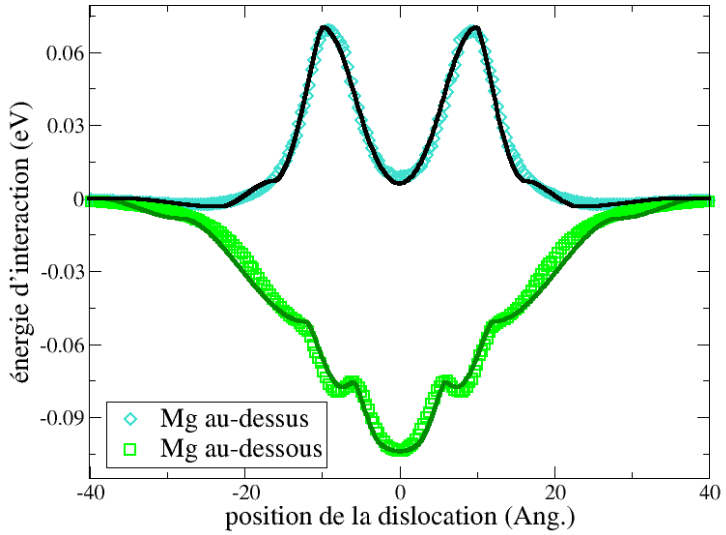
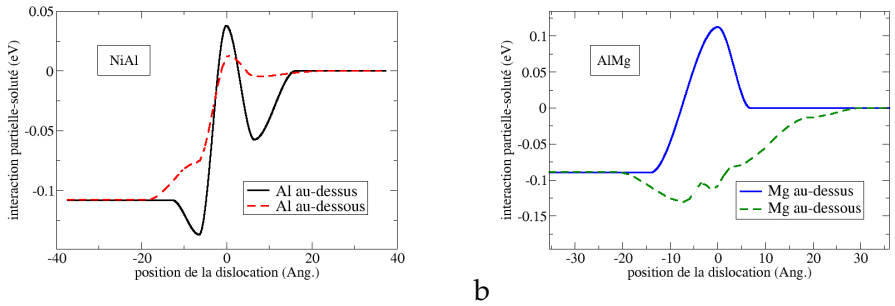


FIGURE 5.26 – *Même graphique que 5.25 pour une dislocation coin dans l'aluminium franchissant un atome de magnésium. Les obstacles correspondent aux figures 3.7 (a) et (b).*

ment, l'énergie interne dans le modèle de TL s'écrit :

$$U(x) = \frac{\Gamma_p}{\sqrt{3}b}\sum_k((x_k^t - x_{k-1}^t)^2 + (x_k^q - x_{k-1}^q)^2) + \frac{k_\gamma}{2}(x_k^t - x_k^q - d)^2 + \sum_i V_j^t(x^t - x_{k,i}) + \sum_i V_j^q(x^q - x_{k,i}). \tag{5.11}$$

Cette énergie est calculée au cours du cisaillement d'un obstacle pour une contrainte appliquée supérieure à la contrainte critique. Nous réalisons une procédure d'ajustement du potentiel d'interaction dislocation-obstacle $V(x)$ pour les obstacles constitués d'atomes de soluté isolés. Dans le cas d'un soluté isolé placé en x_k, nous avons simplement $i = 1$, $j = 1$ et $\sum_i V_j(x^t - x_{k,i}) = V_1(x^t - x_k)$. En utilisant l'équation 5.11, nous ajustons les potentiels $V(x)$ à l'aide de polynômes quartiques afin d'interpoler les maxima de $U(x)$. À partir des abscisses et des valeurs de ces maxima ainsi que des conditions de continuité et de dérivabilité entre intervalles interpolés, nous déterminons les coefficients des polynômes de manière cohérente avec l'énergie interne $U(x)$ calculée dans les simulations atomistiques.



a b

FIGURE 5.27 – *Potentiel d'interaction d'une dislocation partielle de dislocation coin avec un soluté isolé situé au-dessus (traits continus) et au-dessous (traits discontinus) du plan de glissement dans les différents métaux : (a) Al dans Ni et (b) Mg dans Al.*

Les comparaisons entre les énergies internes $U(x)$ obtenues dans les simulations atomistiques et leurs ajustements par le modèle de TL sont reportées sur les figures 5.25 et 5.26 respectivement pour un atome d'Al dans Ni et un atome de Mg dans Al. Nous observons que le modèle de TL ajusté reproduit de manière satisfaisante l'énergie interne au cours du cisaillement d'un soluté dans les deux alliages étudiés. Dans le cas d'un obstacle de type $j = 1$ constitué d'un soluté isolé, il est commode d'utiliser un potentiel d'interaction pour la dislocation partielle de tête symétrique du potentiel d'interaction de la partielle de queue selon la relation $V_1^t(x) = V_1^q(-x)$. Ces potentiels d'interactions entre un atome de soluté isolé et une dislocation partielle sont reportés sur les figures 5.27 (a) et (b).

Potentiel d'interaction des paires d'atomes de soluté

Dans des études précédentes (Rodary et al. 2004, Proville et al. 2006), le rôle de l'ancrage des paires de solutés a été mis en avant pour expliquer le taux de durcissement linéaire de l'alliage de Ni(Al). Afin de tendre vers

la description de l'interaction d'une dislocation avec une solution solide concentrée, nous décrivons également l'interaction avec les paires de solutés. Toutefois, comme nous l'avons étudié dans le chapitre 3, la multiplicité des configurations de dimères est très importante. Nous nous restreignons donc aux dimères dont les forces d'obstacle sont les plus élevées correspondant pour les dislocations coin aux dimères premiers voisins situés sur le plan au dessus du plan de glissement. Ces trois configurations de paires de solutés sont schématisées sur les figures 5.28 (a), (b) et (c).

Nous réalisons la même procédure d'ajustement que dans le cas des obs-

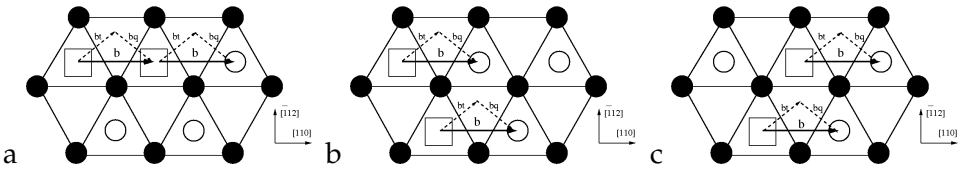


FIGURE 5.28 – *Configurations de paires de solutés non croisantes situées au-dessus du plan glissement de directions* [110] *(a),* [011] *(b) et* [10$\bar{1}$] *(c).*

tacles de type $j = 1$ constitués d'atomes de soluté isolé. Les résultats des ajustements sont reportés sur les figures 5.29 pour les trois types de paires étudiées notées $j = 2$ dans les deux alliages. Comme dans le cas des solutés isolés, la procédure d'ajustement nous permet de reproduire de manière satisfaisante avec le modèle de TL les paysages d'énergie interne calculés à partir des simulations atomistiques. Dans l'alliage de Ni(Al), il est intéressant de noter que l'interaction des dimères de direction [011] et [10$\bar{1}$] (cf. figures 5.28 (b) et (c)) avec les dislocations partielles est clairement dissymétrique. Cette différence d'interaction avec chaque dislocation partielle reflète l'anharmonicité de l'interaction entre les atomes de soluté. Lorsque la paire de solutés est comprimée dans le cœur de la dislocation partielle, l'énergie interne augmente fortement. Inversement, lorsque la distance entre les solutés formant le dimère s'accroît dans le cœur de la dislocation, l'énergie interne augmente mais jusqu'à des valeurs moins élevées. Cet effet est pratiquement absent dans Al(Mg).

5.3.2 Résultats du modèle de tension de ligne

Afin de comparer directement les simulations atomistiques aux simulations de TL, nous étudions une solution solide modèle dont les atomes de soluté sont distribués uniquement dans le plan contigu supérieur au plan de glissement, comme schématisé sur la figure 5.30. Cette configuration nous permet de décrire par le modèle de TL l'interaction de la dislocation dissociée avec une solution solide constituée de solutés isolés et de paires de solutés décrite précédemment. Nous soulignons que le modèle de TL a seulement été ajusté sur les interactions élémentaires entre dislocation coin et obstacles isolés. Cette procédure d'ajustement est indépendante du calcul de la contrainte d'écoulement pour laquelle aucun ajustement n'est utilisé.

En parallèle des simulations de TL, nous réalisons des simulations atomistiques dans une même solution solide comme schématisées sur la figure 5.30 dont les atomes de soluté sont distribués aléatoirement sur le réseau hexagonal du plan contigu (1$\bar{1}$1) supérieur au plan de glissement.

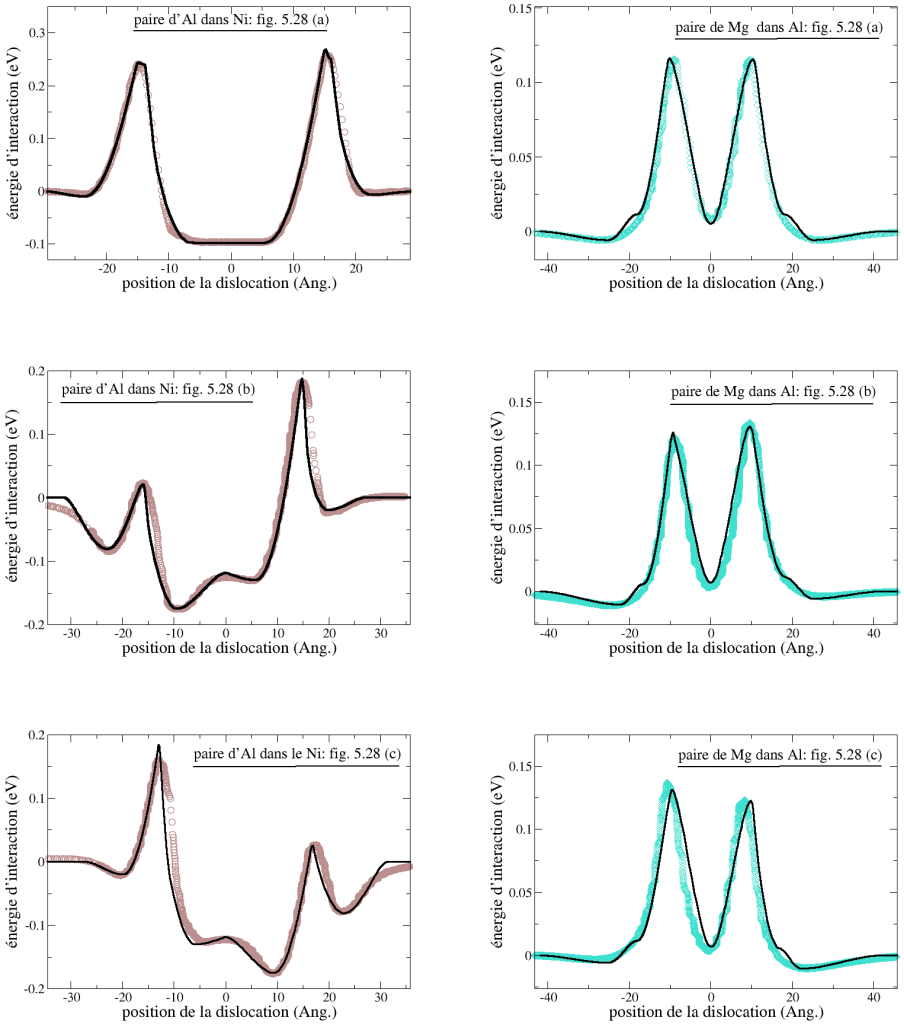


FIGURE 5.29 – *Énergie potentielle interne en fonction de la position moyenne d'une dislocation coin dans le Ni(Al) (gauche) et l'Al(Mg) (droite) franchissant une paire d'atomes de soluté située dans le plan au-dessus du plan de glissement. Les courbes continues représentent les calculs de TL ajustés sur les résultats de simulations atomistiques (symboles).*

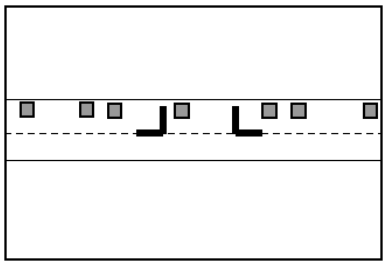


FIGURE 5.30 – *Schéma du système étudié par les deux méthodes de simulations : atomistiques et modèle de TL. La solution solide ne contient des atomes de soluté que dans le plan contigu supérieur au plan de glissement. Les symboles carrés représentent les atomes de soluté distribués aléatoirement suivant une concentration atomique en soluté* c_s.

La longueur des dislocations L_y et leur distance de glissement sont les mêmes dans les deux types de simulations. Afin d'échantillonner le calcul de la contrainte d'écoulement sur un grand nombre de configurations pour chaque concentration, nous choisissons un système de petite taille pour lequel les calculs sont rapides. La longueur du système dans la direction de la ligne de dislocation est $Ly = 28b$ et la dislocation doit glisser sur une distance égale à $24b$.
Dans le modèle de TL, chaque site du réseau hexagonal est défini comme occupé ou inoccupé après la distribution des solutés. Pour chaque site occupé, c'est-à-dire contenant un obstacle de type $j = 1$, nous explorons les sites premiers voisins afin de reconnaître des configurations de dimères schématisés sur les figures 5.28 (a), (b) et (c). Si nous rencontrons un dimère, un des deux sites occupés est alors considéré comme une paire de type $j = 2$ qui est fonction de l'orientation du dimère. Le deuxième site est considéré comme inoccupé, ce qui évite un double comptage des obstacles. La dynamique de Langevin des deux lignes élastiques est intégrée numériquement ce qui permet de relaxer les forces agissant sur les dislocations partielles. Comme pour les simulations atomistiques, sous l'effet de contrainte appliquée τ_{app}, le système converge vers une position stable ou alors la dislocation glisse à travers la population d'obstacles.

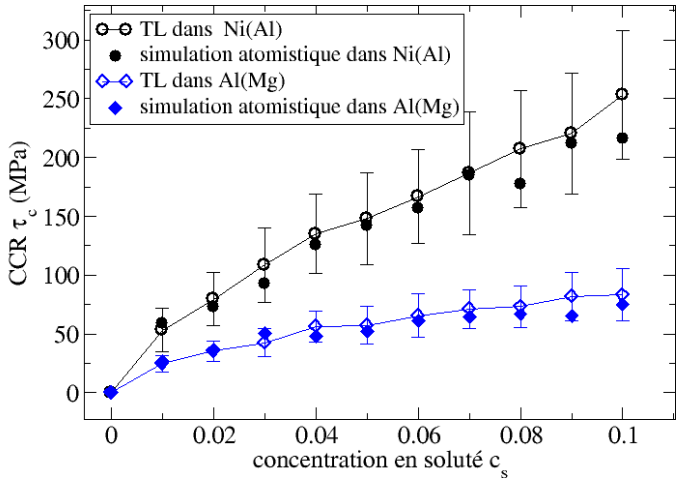


FIGURE 5.31 – *Contrainte critique résolue de glissement τ_c pour une dislocation coin dans les solutions solides simulées de Ni(Al) (cercles) et Al(Mg) (losanges) en fonction de la concentration en soluté c_s. Les solutions solides correspondantes ne contiennent des solutés que dans le plan contigu supérieur au plan de glissement. Les symboles pleins et ouverts correspondent respectivement aux simulations atomistiques et au modèle de TL.*

Pour chaque concentration, nous réalisons le calcul de la moyenne de la contrainte d'écoulement τ_c. La moyenne est calculée sur 20 réalisations pour les simulations atomistiques et sur 60 réalisations pour les simulations de TL pour lesquelles les calculs sont bien plus rapides. Les résultats des deux types de simulations sont reportés sur la figure 5.31 montrant un accord quantitatif dans les deux alliages de Ni(Al) et Al(Mg)

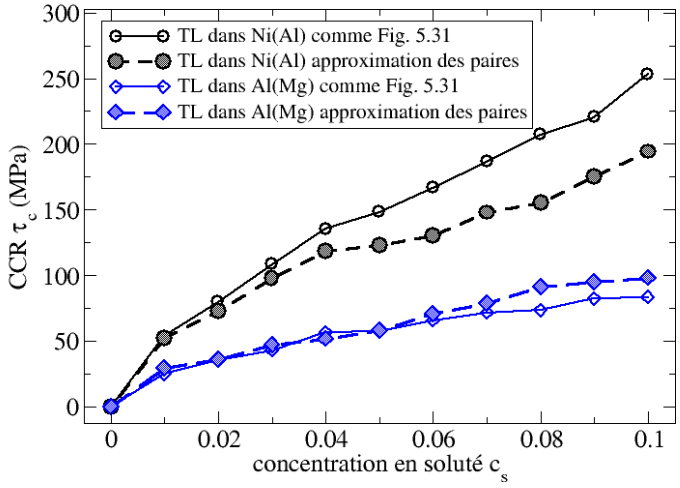


FIGURE 5.32 – *Contrainte critique résolue de glissement τ_c pour une dislocation coin dans les solutions solides simulées de Ni(Al) (cercles) et Al(Mg) (losanges) en fonction de la concentration en soluté c. Les solutions solides correspondantes ne contiennent des solutés que dans le plan contigu supérieur au plan de glissement. Les symboles correspondent aux simulations du modèle de TL décrivant les paires de solutés (symboles ouverts) et ne décrivant que des solutés isolés (symboles pleins).*

sur l'ensemble de la gamme de concentration.

Nous pouvons à présent chercher à identifier les origines des différences entre les deux alliages. Il est par exemple intéressant de comparer le calcul de τ_c à partir du modèle de TL décrivant les paires de solutés explicitement avec un modèle de TL ne décrivant que des solutés isolés. Cette comparaison est réalisée sur la figure 5.32. Nous montrons que la majeure partie de la contrainte d'écoulement est due aux atomes de soluté isolés. C'est la force d'ancrage des solutés isolés dans Ni(Al) par rapport à celle dans Al(Mg) qui explique la différence de durcissement entre ces deux alliages.
D'autre part, il est clair que dans l'alliage de Ni(Al) les paires d'atomes de solutés jouent un rôle important dans la description du DSS ce qui confirme les travaux de Rodary et al. (2004), Proville et al. (2006). En effet, à partir d'une concentration atomique égale à $c_s = 4\%$, les deux descriptions divergent avec l'augmentation de la concentration en soluté suivant l'accroissement rapide de la densité de paires de solutés. Pour une concentration $c_s = 10\%$, la CCR calculée sans décrire explicitement les paires de solutés sous-estime d'environ 20% τ_c. Il est de plus remarquable d'observer que le taux de durcissement change également avec l'effet des paires de solutés. L'effet des paires augmente le taux de durcissement dans Ni(Al) alors qu'il diminue dans Al(Mg).

Nous pouvons donc conclure qu'une description basée sur l'interaction avec les atomes de soluté isolés est suffisante pour décrire qualitativement la contrainte d'écoulement d'une solution solide. En revanche, dans une solution solide concentrée, il est nécessaire de prendre en compte les

paires de solutés si nous souhaitons obtenir une description correcte du taux de durcissement.

Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons décrit le DSS des deux types de dislocations glissiles coin et vis dans les alliages modèles de Ni(Al) et Al(Mg). La contrainte d'écoulement statique augmente avec la concentration en solutés suivant des statistiques différentes dans les deux alliages en accord avec les résultats expérimentaux disponibles.
Nous observons que le durcissement provenant des dislocations de caractère coin et vis est du même ordre de grandeur. Ce résultat explique notamment l'isotropie des microstructures de dislocation des alliages CFC observée expérimentalement.
Nous avons identifié les obstacles les plus significatifs pour décrire le DSS. Dans les quatre systèmes étudiés, approximativement 80% de la contrainte critique d'écoulement est produite par l'ancrage des atomes de soluté situés dans les plans contigus au plan de glissement.
Nous reproduisons la variation de la distance de dissociation d'une dislocation en solution solide en prenant en compte la variation des constantes élastiques et de l'énergie de faute d'empilement avec la concentration en atomes de soluté.
La comparaison rigoureuse des résultats des simulations atomistiques avec les prédictions des modèles analytiques de DSS sans paramètre ajustable montre seulement un accord qualitatif mais surtout, les modèles de DSS ne permettent pas de comprendre les différentes statistiques de durcissement pour des alliages de matrices différentes.
En développant un modèle de TL justifié physiquement à partir des simulations atomistiques, nous montrons que le DSS ne peut être décrit qu'en prenant en compte la dissociation des dislocations et la nature différente des obstacles rencontrés par la dislocation. La description des obstacles en termes de soluté isolé et de paires de solutés reproduit quantitativement la contrainte d'écoulement calculée par les simulations atomistiques. Dans une solution solide concentrée, c'est le détail atomique de l'interaction non-linéaire dislocation-obstacle qui explique le DSS.

À ce stade, nous avons réalisé une étude approfondie de la description du problème du DSS dans la limite d'une température nulle. Nous pouvons désormais nous pencher sur le comportement dynamique d'une dislocation dans une solution solide en étendant notre description à une température finie.

6 Trajectoire d'une dislocation en solution solide

Sommaire

6.1 Dynamique moyenne d'une dislocation en solution solide . . . 155
6.2 Interfaces élastiques en présence d'un désordre gelé . 157
6.3 Topologie d'une dislocation au voisinage de la contrainte critique . . . 159
6.4 Propagation d'une dislocation par dynamique d'avalanches . . . 163
6.4.1 Description des avalanches . . . 163
6.4.2 Statistiques des formes et des durées d'avalanches . . . 164
6.4.3 Transition de phase et limite d'écoulement . . . 167
Conclusion . . . 169

Ce chapitre étudie le comportement d'une dislocation glissant dans une solution solide à température finie. Contrairement au franchissement d'un atome de soluté isolé, il n'est techniquement pas envisageable de simuler la propagation thermiquement activée d'une dislocation dans une solution solide. Il est en revanche possible d'étudier le glissement d'une dislocation au voisinage de la contrainte critique d'écoulement. L'objectif est ici d'étendre la description de la dynamique d'une dislocation dans un alliage au-delà de la relation classique liant la vitesse moyenne stationnaire à la contrainte appliquée.

Pour cela, nous mettons en œuvre des simulations de dynamique moléculaire de glissement d'une dislocation coin soumise à une contrainte constante. Les trajectoires de la dislocation sont simulées dans un alliage de $Ni_{0.9}Al_{0.1}$, à basse température, afin de mettre en évidence l'effet du désordre dû à la solution solide, tout en minimisant celui de la température.
Dans un premier temps, nous analysons la forme de la ligne de dislocation au cours de son glissement pour une contrainte proche de la contrainte

critique d'écoulement. Ce système nous permet de calculer les exposants critiques caractéristiques de la propagation d'une ligne élastique évoluant dans un désordre gelé.
Dans un deuxième temps, nous décrivons le glissement de la dislocation comme une dynamique d'avalanche. Cette description est l'occasion d'étudier la forme et la statistique des avalanches au voisinage de la contrainte critique.

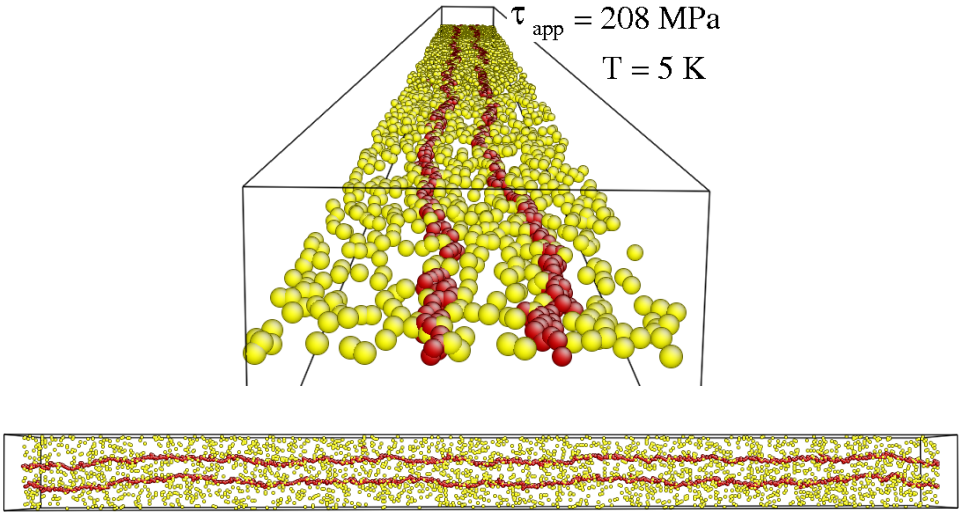


FIGURE 6.1 – *Images caractéristiques des simulations de dynamique moléculaire décrites dans ce chapitre vues en perspective (dessus) et selon la direction perpendiculaire au plan de glissement (dessous). Les simulations sont réalisées à une contrainte imposée constante. Les atomes représentés correspondent aux dislocations partielles (rouge) et aux impuretés (jaune) appartenant aux plans contigus au plan de glissement. Au cours de son passage, la dislocation interagit avec la population d'atomes de soluté placés en solution solide idéale.*

6.1 Dynamique moyenne d'une dislocation en solution solide

Après avoir étudié le seuil statique de glissement d'une dislocation dans une solution solide, nous souhaitons décrire son comportement en température. Néanmoins, il est difficile de simuler directement par DM l'activation thermique du glissement d'une dislocation dans une solution solide pour une contrainte inférieure à la contrainte d'écoulement. Ainsi, la méthode présentée dans le chapitre 4 pour étudier le franchissement thermiquement activé d'un soluté isolé n'est pas transposable directement au cas des solutions solides. En effet, les solutions solides considérées dans nos travaux contiennent un nombre d'atomes environ 50 fois supérieur au système ne mettant en jeu qu'un atome de soluté avec une dislocation. Le calcul du temps d'attente avant le dépiégeage d'une dislocation à partir d'une configuration stable augmenterait alors dans les mêmes proportions pouvant conduire à des simulations d'une année, le calcul de DM étant proportionnel au nombre d'atomes.
À côté des problèmes techniques, l'étude de l'activation thermique dans un milieu désordonné est particulièrement complexe d'un point de vue théorique. Le long de la ligne de dislocation, il existe plusieurs sites thermiquement activables qui peuvent être corrélés entre eux et dont les barrières d'énergie d'activation varient sur une large gamme. En outre, il est nécessaire de prendre en compte la possibilité de retour en arrière de la dislocation. Tous ces phénomènes rendent difficile la définition des événements rares à considérer et de là, leur modélisation par la TET (Isaac et Granato 1988) à l'instar du franchissement d'un obstacle unique traité dans le chapitre 4. Il existe néanmoins d'autres approches théoriques pour décrire ce régime thermiquement activé à basse température utilisant la Théorie des Groupes de Renormalisation (Chauve et al. 2000).
Pour éviter ces difficultés techniques et théoriques, les études de glissement d'une dislocation en solution solide par simulation atomistique se sont restreintes le plus souvent à des contraintes bien supérieures à la contrainte d'écoulement τ_c. Pour des vitesses de dislocation inférieures à la vitesse du son, ces études ont permis de relier linéairement la contrainte appliquée à la vitesse stationnaire de la dislocation Rodary et al. (2004), Olmsted et al. (2005), Marian et Caro (2006), Tapasa et al. (2006).

En faisant l'analogie avec une ligne élastique évoluant dans un milieu désordonné, la relation entre la contrainte appliquée et la vitesse moyenne d'une dislocation dans une solution solide est schématisée sur le graphique 6.2 (Chauve et al. 2000). Le régime thermiquement activé, ou au sens large régime de fluage, correspond à une contrainte appliquée $\tau_{app} < \tau_c$ inférieure à la contrainte d'écoulement. Dans ce régime la dislocation avance par rapport à sa position initiale jusqu'à être piégée sur une position stable, puis se propage seulement par activation thermique. Pour une contrainte $\tau_{app} >> \tau_c$ la dislocation se déplace rapidement. Asymptotiquement, la dynamique de la ligne se ramène à un cas sans désordre où la vitesse de la dislocation est proportionnelle à la contrainte appliquée. C'est ce régime qui a été principalement étudié dans les études précédentes mettant en œuvre des simulations atomistiques de dislocation

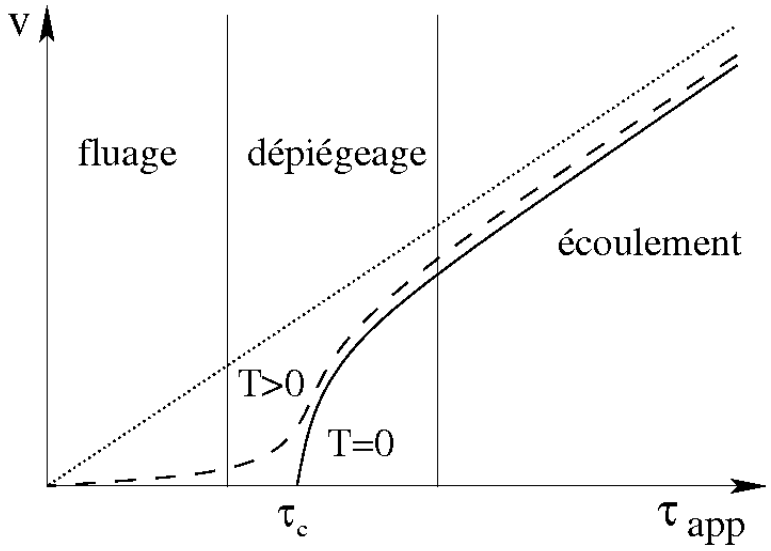


FIGURE 6.2 – *Vitesse schématique v d'une dislocation en fonction de la contrainte appliquée τ_{app}. Du fait des impuretés, il existe un seuil de contrainte τ_c. La droite pointillée correspond au cas en absence de désordre pour lequel la relation contrainte/vitesse est proportionnelle. Les trois régimes dynamiques d'une ligne élastique en présence d'un désordre gelé sont représentés pour une température nulle (trait continu) et à température finie (trait discontinu) (Chauve et al. 2000).*

glissant dans un alliage. La contrainte critique d'écoulement τ_c marque la transition entre une dislocation ancrée et une dislocation en mouvement. Lorsque la contrainte appliquée se rapproche par le haut de τ_c, des comportements critiques sont attendus : autrement dit, on s'attend à observer au voisinage de τ_c des des lois d'échelles et des distributions statistiques invariantes d'échelles caractérisées par des exposants *universelles*, indépendamment de la forme, de la nature et de la concentration des défauts. En particulier, la vitesse de la dislocation tend à s'annuler suivant une divergence $v \sim (\tau_{app} - \tau_c)^\theta$ (Rosso 2002). Nous nous proposons dans ce chapitre d'étudier la dynamique de la dislocation au voisinage de la contrainte d'écoulement, c'est-à dire dans le régime de dépiégeage.

Nous simulons des trajectoires d'une dislocation coin dans un alliage de $Ni_{0.9}Al_{0.1}$ à une température T de $5K$. Nous réalisons des simulations à basse température afin de mettre en évidence l'effet du désordre dû à la solution solide en minimisant celui de la température, lequel adoucit la transition de dépiégeage. À cause de la dissipation d'énergie due au glissement des dislocations, nous utilisons dans ces simulations un thermostat développé par Berendsen et al. (1984) pour maintenir la température du système autour d'une température moyenne. Les trajectoires simulées sont reportées sur la figure 6.3 pour plusieurs contraintes appliquées inférieures à la contrainte d'écoulement statique comprises entre $\tau_{app} = 119$ et $\tau_{app} = 268$ MPa. Nous intégrons la dynamique de la dislocation pendant un temps de 100 picosecondes. Aux faibles niveaux de contraintes correspondant à $\tau_{app} = 119$ et $\tau_{app} = 149$ Mpa, la dislocation reste piégée après avoir glissé sur une dizaine de nanomètres. Il est remarquable de noter que, sur les temps d'intégration considérés dans cette étude, la contrainte critique d'écoulement semble se situer autour de

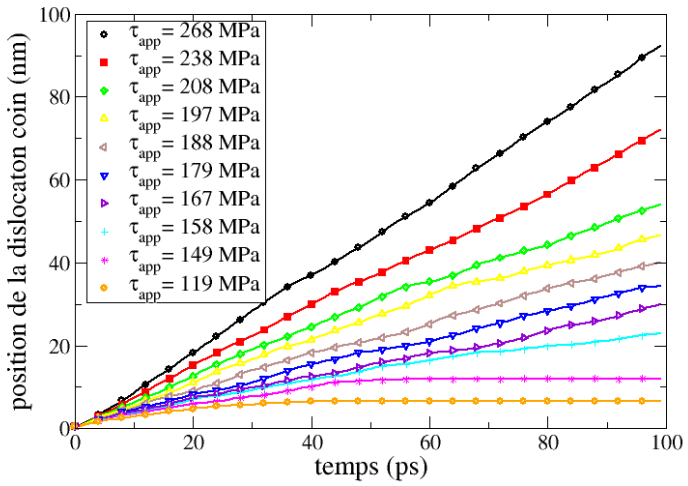


FIGURE 6.3 – *Position moyenne d'une dislocation coin dans une solution de Ni(Al) en fonction du temps de simulation pour plusieurs contraintes appliquées. La concentration en aluminium est de* 10% *et la température de* 5K.

2/3 de la contrainte statique calculée dans le chapitre précédent. Nous supposons que cette chute de la contrainte peut être attribuée aux effets d'inertie importants aux basses températures. Pour comparer rigoureusement les contraintes d'écoulement statiques et dynamiques, il est néanmoins nécessaire de prolonger les simulations de dynamique moléculaire jusqu'aux distances de glissement explorées dans les simulations statiques c'est-à dire sur des distances de 100 nanomètres.

6.2 Interfaces élastiques en présence d'un désordre gelé

Nous avons étudié par simulation atomique la topologie des dislocations dans un alliage désordonné. Ces dernières prennent une forme rugueuse résultant de la compétition entre l'élasticité de la ligne de dislocation, qui tend à la maintenir rectiligne, et la force du désordre. Le paysage énergétique imposé par le désordre est complexe et présente de nombreuses configurations métastables. Nous parlons de transition de dépiégeage pour ce type de système où il est nécessaire d'appliquer une force supérieure à une certaine valeur seuil pour mettre l'objet élastique en mouvement dans le milieu désordonné. Ces situations où des interfaces élastiques se déplacent dans un milieu désordonné se rencontrent dans beaucoup d'autres domaines de la physique. Les parois de domaines magnétiques, les fronts de fracture ou d'imbibition d'un milieu poreux rentrent dans cette classe de problèmes. Ces systèmes très différents partagent pourtant un certain nombre de point commun : les comportements au voisinage de la force seuil sont critiques. Nous nous attendons donc à observer des propriétés d'invariance d'échelle universelles, indépendantes du type ou de la quantité de défauts pour une dislocation glissant en solution solide. Nous présentons ici brièvement les outils permettant de dé-

crire phénoménologiquement la forme et la dynamique de ces interfaces comme reportées sur la figure 6.4. Pour décrire la forme rugueuse et la dynamique des lignes de dislocation en solution solide, nous faisons appel à ces outils développés dans le cadre de l'étude des objets fractals.
Au voisinage de la force critique, le mouvement d'une ligne élastique en présence d'un désordre gelé apparaît comme très intermittent, avec des phases piégées, entrecoupé de sauts brusques appelés avalanches. La taille moyenne de ces avalanches diverge en ce rapprochant de la force critique appliquée à l'interface. Dans notre cas, cette force critique correspond à la contrainte d'écoulement τ_c. La taille maximum des avalanches l_{av} (ou longueur de corrélation de la ligne en propagation) diverge pour $\tau_{app} \to \tau_c^+$ avec un exposant ν comme :

$$l_{av} \sim (\tau_{app} - \tau_c)^{-\nu}. \tag{6.1}$$

La statistique de la dynamique de la ligne au voisinage du seuil de dépiégeage est en fait caractérisée par plusieurs exposants. Nous nous attendons à ce que ces exposants soient reliés entre eux par des relations universelles, c'est-à-dire des relations identiques pour une classe de problèmes équivalents, indépendamment de l'origine du désordre et du type d'interaction (Kardar 1998).

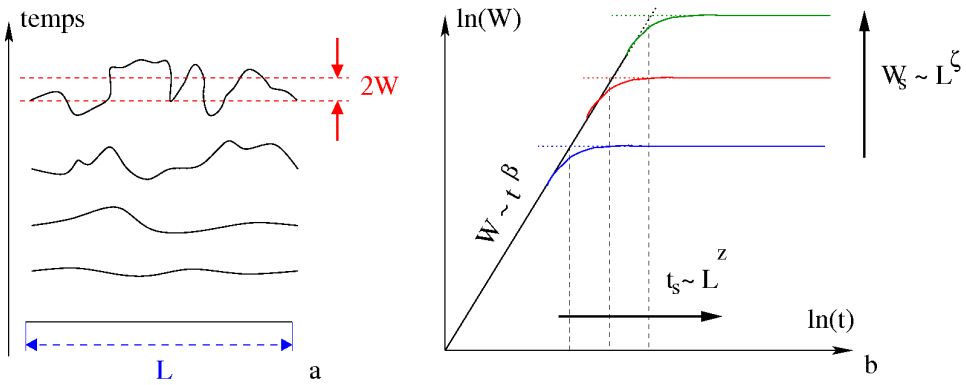


FIGURE 6.4 – *Caractéristique topologique d'une ligne élastique en présence d'un désordre. (a) À l'origine du temps t la ligne élastique de longueur L est droite. Au fur et à mesure l'étalement moyen de la ligne mesurée par son écart type W augmente jusqu'à saturation. (b) Représentation schématique en échelle logarithmique de l'étalement moyen de la ligne en fonction du temps pour plusieurs tailles de systèmes différents. Les quantités W , L et t sont liées par des lois de puissance caractérisées par les exposants critiques dynamique z, de croissance β et de rugosité ζ.*

Pour illustrer les relations décrivant la forme et la dynamique d'une ligne élastique en présence de désordre, nous présentons sur la figure 6.4 le cas d'une interface rectiligne à l'origine de longueur L (Barabasi et Stanley 1995). La forme de la ligne est caractérisée par son étalement moyen W c'est-à-dire l'écart type par rapport à la position moyenne. À l'origine pour un temps $t = 0$ l'interface est rectiligne et $W = 0$. L'étalement croît avec le temps suivant une loi de puissance :

$$W \sim t^{\beta}, \tag{6.2}$$

avec β l'exposant de croissance. L'étalement de la ligne croît jusqu'à un temps t_s pour lequel W sature. Le temps de saturation dépend de la taille

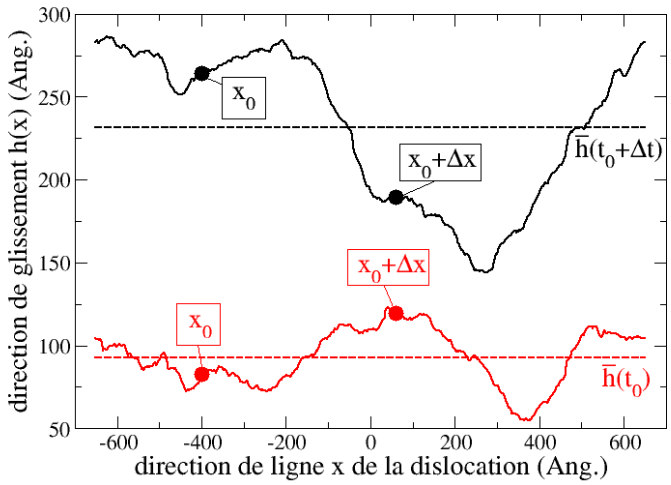


FIGURE 6.5 – *Dislocation coin dans une solution solide de Ni(Al) contenant* 10% *d'aluminium à une température de* 5K. *La dislocation coin est représentée avec sa position moyenne* $\bar{h}$ *à deux instants différents* t_0 *et* $t_0 + \Delta t$. *Les configurations successives enregistrées permettent de calculer la fonction de corrélation à deux points* $G(\Delta x, \Delta t)$ *en espace et en temps.*

du système L et suit une loi de la forme :

$$t_s \sim L^z, \tag{6.3}$$

où z est l'exposant dynamique. La valeur de W_s à la saturation s'écrit également sous la forme d'une loi de puissance dépendant de l'exposant de rugosité ζ :

$$W_s \sim L^\zeta. \tag{6.4}$$

L'interface possède par conséquent un étalement W_s au bout d'un temps t_s. Nous pouvons par conséquent exprimer $W_s \sim t_s^\beta$, ce qui nous fournit la loi d'échelle $z = \zeta/\beta$ (Barabasi et Stanley 1995).
Dans nos simulations la taille L des dislocations est constante. En pratique, nous ne calculons donc pas l'étalement W mais la fonction de corrélation à deux points le long de la ligne de la dislocation qui s'écrit :

$$G(\Delta x, \Delta t) = \left[\left\langle (h(x_0 + \Delta x, t_0 + \Delta t) - h(x_0, t_0))^2 \right\rangle_{x_0, t_0}\right]^{1/2}, \tag{6.5}$$

où x est l'abscisse d'un point courant le long de la ligne, h sa position dans la direction de glissement de la dislocation. Les doubles crochets indiquent une moyenne sur la longueur de chaque ligne et sur l'ensemble des configurations simulées. Le calcul de la fonction de corrélation G est réalisé à partir des positions moyennes des dislocations partielles relevées dans nos simulations comme reporté sur la figure 6.5. À la transition de dépiégeage, la fonction G possède les mêmes propriétés d'échelle que l'étalement W.

6.3 Topologie d'une dislocation au voisinage de la contrainte critique

Expérimentalement, la description du comportement plastique des métaux en terme de transition de piégéage-dépiégeage a déjà été employée par Zaiser et al. (2004). La forme et la dynamique d'une dislocation en présence de désordre ont été étudiées par Bakó et al. (2008) dans le cas d'une dislocation interagissant avec une population de précipités incisaillables par simulation de DDD. Zapperi et Zaiser (2001) ont simulé l'incération d'une dislocation avec d'autres types d'obstacles comme les dislocations de la forêt quand Moretti et al. (2004) ont analysé les lois d'échelle des assemblées de dislocations sous forme d'empilement ou de joints de grains de faible désorientation. Ces différentes études font usage de la théorie élastique linéaire pour traiter l'interaction entre les segments de dislocation décrits comme des lignes élastiques.
Dans nos simulations, les obstacles sont constitués par les atomes de soluté et sont traités au niveau atomique. Au cours de son glissement, la dislocation expérimente plusieurs positions stables et adopte une forme rugueuse du fait de l'interaction avec les atomes de soluté le long de la ligne de dislocation. Nous notons que des profils sinueux analogues de dislocation ont déjà été observés dans des solutions solides de Cu(Al) et Cu(Si) en microscopie électronique à transmission par Cockayne et al. (1969) et Saka (1985).

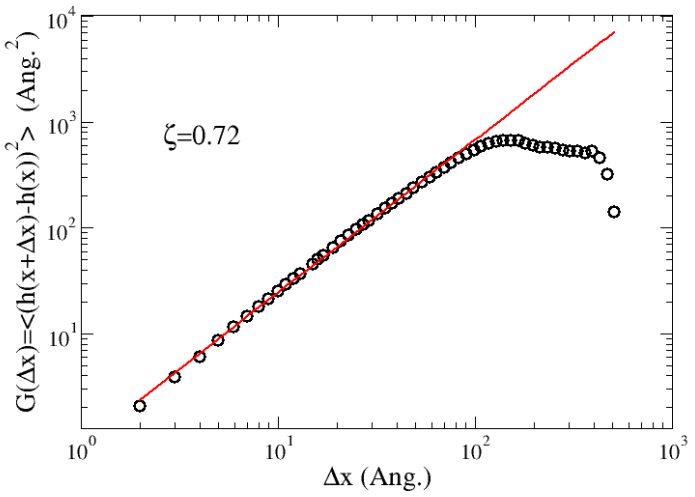


Figure 6.6 – *Fonction de corrélation $G(\Delta x, 0)$ en fonction de la distance entre deux points Δx le long de la dislocation à un même instant. La pente de la droite du graphique logarithmique correspond à la mesure de l'exposant de rugosité ζ.*

Pour une contrainte proche de la contrainte critique, la fonction de corrélation G donnée par l'équation 6.5 nous permet de calculer les exposants critiques décrits précédemment. Nous choisissons de travailler avec la trajectoire la plus proche du seuil de dépiégeage de la figure 6.3 c'est-à-dire pour une contrainte appliquée $\tau_{app} = 158$ MPa. Le choix de cette

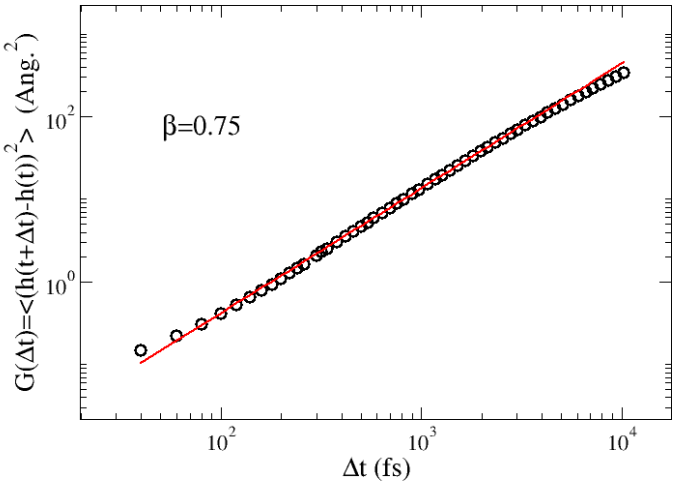


FIGURE 6.7 – *Fonction de corrélation $G(0, \Delta t)$ en fonction des intervalles de temps Δt entre deux configurations au cours de la dynamique de la dislocation à une même abscisse x. La pente de la droite du graphique logarithmique correspond à la mesure de l'exposant de croissance β.*

trajectoire, comme trajectoire la plus proche de la contrainte critique, sera validé dans la section 6.4.3. À partir de la fonction de corrélation G, nous calculons l'exposant de rugosité comme :

$$G(\Delta x, 0) = \left[\left\langle (h(x_0 + \Delta x, t_0) - h(x_0, t_0))^2 \right\rangle_{x_0, t_0}\right]^{1/2} \sim \Delta x^{\zeta}. \tag{6.6}$$

Nous reportons sur la figure 6.6 le calcul de l'exposant de rugosité ζ. Nous observons que la relation 6.6 n'est valide que sur un certain intervalle de longueur Δx. La limite inférieure de validité correspond à la taille du réseau atomique du plan de glissement de la dislocation le long de la ligne de dislocation soit $\sqrt{3}b$. La limite supérieure correspond à la taille du système simulé c'est-à-dire à la taille de la boîte de simulation dans la direction de la ligne de dislocation L_y. Nous notons que dans le cas d'un système périodique comme le notre, la limite de validité de la relation 6.6 ne coïncide strictement avec L_y qu'à la transition de dépiégeage pour laquelle la longueur de corrélation diverge (H. et al. 1996, Nukala et al. 2008). La limite supérieure de la relation 6.6 sur la figure 6.6 est donc plus faible que la taille du système.
À partir de la même trajectoire correspondant à une contrainte appliquée de $\tau_{app} = 158$ MPa nous calculons l'exposant de croissance comme :

$$G(0, \Delta t) = \left[\left\langle (h(x_0, t_0 + \Delta t) - h(x_0, t_0))^2 \right\rangle_{x_0, t_0}\right]^{1/2} \sim \Delta t^{\beta}. \tag{6.7}$$

Nous reportons sur la figure 6.6 le calcul de l'exposant de croissance β. Encore une fois nous observons que la relation 6.7 n'est valide que sur un certain intervalle de temps Δt. La limite inférieure correspond à ce qui peut être qualifié de « volume élémentaire représentatif ». Nous observons que pour une durée Δt inférieure à 100 femtosecondes $G(0, \Delta t)$ s'écarte de la loi de puissance 6.7. Cette limite est en bon accord avec la fréquence

de Debye du cristal de Ni. Comme pour l'exposant de rugosité la limite supérieure de validité de 6.7 dépend de l'écart à la transition critique.

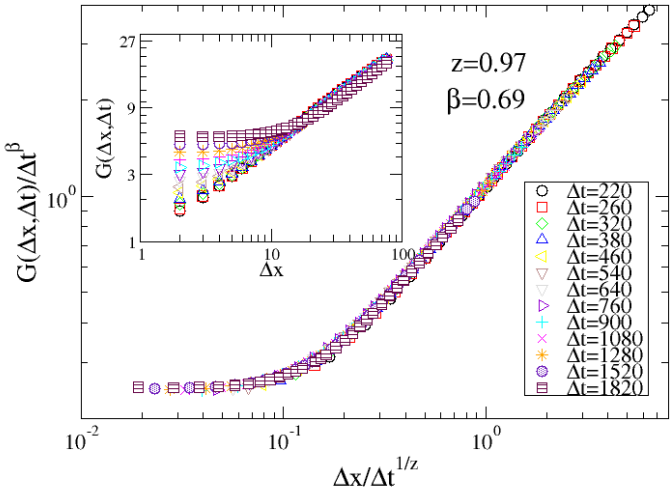


FIGURE 6.8 – *Analyse de Family-Vicsek (Family et Vicsek 1991) permettant la mesure de l'exposant dynamique z. La courbe maîtresse est générée à partir de la fonction de corrélation $G(\Delta x, \Delta t)$ reportée dans l'encadré, calculée le long de la dislocation en fonction de Δx pour plusieurs intervalles de temps Δt.*

Le caractère de la dislocation proche du seuil de dépiégeage est donc auto-affine ce qui décrit dans ce cas la loi d'échelle de la largeur d'interface. Elle est une manifestation de l'anisotropie spatiale d'un fractal. Pour calculer le dernier exposant dynamique nous calculons la relation d'échelle donnée par Family et Vicsek (1991) comme :

$$G(\Delta x, \Delta t) \sim \Delta t^{\beta} g(u = \Delta x / \Delta t^{1/z}) \tag{6.8}$$

$$\text{où } g(u) = \begin{cases} 1 & si \quad u << 1 \\ u^{\zeta} & si \quad u >> 1 \end{cases} \tag{6.9}$$

Pour différentes durées Δt, la réduction de la fonction de corrélation G à une courbe maîtresse nous permet de calculer l'exposant dynamique z comme reporté sur la figure 6.8. Notons que les intervalles de temps Δt sont choisis de manière à être supérieurs à la limite de validité inférieure de la relation 6.7.

Les exposants, calculés pour la trajectoire de dislocation correspondant à une contrainte appliquée égale à $\tau_{app} = 158$ MPa, sont reportés dans le tableau 6.1. Nous observons un bon accord entre les exposants calculés et ceux correspondant à la classe d'universalité dite Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) (Kardar et al. 1986, Csahok et al. 1993, Amaral et al. 1995) qui décrit le mouvement d'une ligne élastique de *courte portée* (Tanguy et al. 1998) se propageant dans un milieu aléatoire. Les exposants correspondant ont été obtenus par Tang et Leschhorn (1992), Buldyrev et al. (1992) en identifiant ce problème à celui de la Percolation Dirigée.

Table 6.1 – *Résumé des exposants critiques et comparaison entre nos calculs et le modèle de Dépiégeage de Percolation Dirigée (DPD) (Tang et Leschhorn 1992, Buldyrev et al. 1992)*

Exposant	DPD	Ce travail
ζ	0,633	0,72
β	0,633	0,69
z	1	0,97

Le régime de dépiégeage est particulièrement important car il peut correspondre au comportement des dislocations glissant lors d'un essai mécanique à déformation constante. En effet, lors de la libération des dislocations ancrées, ces dernières accroissent la déformation plastique et relaxent les contraintes au sein du matériau. La contrainte appliquée pendant l'expérience diminue alors localement ce qui se traduit à nouveau par le piégeage des dislocations. Cet équilibre dynamique entre piégeage et dépiégeage autour du seuil de glissement est appelé régime critique auto-organisé. Dès lors, nous comprenons l'utilité de la description des dislocations dans le régime de dépiégeage car elle nous permet de décrire la forme et la dynamique des dislocations entre deux événements d'ancrage.

6.4 Propagation d'une dislocation par dynamique d'avalanches

6.4.1 Description des avalanches

Au voisinage de la transition de dépiégeage, la dynamique de la dislocation se caractérise par des mouvements intermittents. Afin de progresser dans la description spatio-temporelle du comportement d'une dislocation, nous étudions la propagation de la ligne de dislocation en terme de dynamique d'avalanches. Cette description est classique dans le cas des interfaces élastiques en présence de désordre gelé à la transition critique (Amaral et al. 1995).

Figure 6.9 – *Carte d'activité d'une dislocation dans une solution solide de Ni(Al) contenant 10% d'aluminium à une température de 5K. La dislocation est soumise à une contrainte de $\tau_{app} = 188$ MPa et glisse sur une distance de 400 angströms. Les nuances de gris correspondent au temps passé par la dislocation à l'endroit considéré. Plus la nuance est foncée plus la durée est longue.*

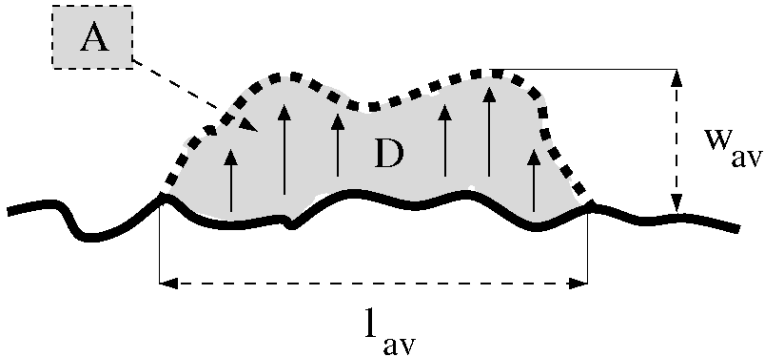


FIGURE 6.10 – *Avalanche schématique d'une dislocation en solution solide. L'avalanche s'étend longitudinalement sur une distance l_{av} et transversalement sur une distance w_{av} pendant la durée D. La taille de l'avalanche est caractérisée par sa surface A.*

Afin de décrire les avalanches, nous suivons la méthode développée par Må løy et al. (2006) dans le cadre expérimental de la propagation d'un front de fissure. Må løy et al. (2006) caractérisent la dynamique du front à partir de cartes d'activité consistant à calculer le temps passé par l'interface élastique à un endroit donné relativement à toute la durée de la trajectoire. Ces cartes donnent donc accès, à partir d'un unique diagramme en deux dimensions, à l'ensemble de l'information spatio-temporelle. Nous calculons la carte d'activité de chaque trajectoire de dislocation en solution solide dont un exemple est reporté sur la figure 6.9. Nous observons des zones où la dislocation est restée piégée (zones grisées) un certain temps, entrecoupée de zones de glissement rapides (zones claires).
Dans la section précédente, nous avons montré que la dislocation possède presque partout une vitesse non nulle le long de la ligne. Une des difficultés de l'étude des avalanches est donc de déterminer un critère pour définir le début et la fin d'une avalanche. La figure 6.10 schématise une avalanche définie par sa longueur longitudinale l_{av}, transversale w_{av}, sa surface A et sa durée D. Une avalanche commence par un saut brusque de la ligne pour retourner à un état piégé. Pour détecter une ligne piégée, un critère naturel consiste à considérer la ligne comme piégée quand sa vitesse est partout inférieure à une vitesse de dérive $C = Cst < V >$ par rapport à la vitesse moyenne de la dislocation $< V >$. Ainsi, les caractéristiques d'une avalanche reportées sur la figure 6.10 dépendent de la vitesse de dérive choisie, laquelle entraîne un seuillage différent de détection des avalanches. Enfin, il est nécessaire de se pencher sur le cas d'événements simultanés. Le caractère non local de l'élasticité de la dislocation peut induire, a priori, que deux décrochements simultanés font partie de la même avalanche, même si les deux régions concernées ne sont pas connectées. Dans la suite, nous considérons ces événements simultanés disjoints comme des avalanches individuelles et non corrélées.

6.4.2 Statistiques des formes et des durées d'avalanches

Afin de caractériser la dynamique de la dislocation, nous avons procédé à une étude statistique des avalanches paramétrées suivant la figure 6.10. Nous étudions cette dynamique au voisinage de la transition de dépiégeage c'est-à-dire pour la trajectoire correspondant à une contrainte

appliquée $\tau_{app} = 158$ MPa.

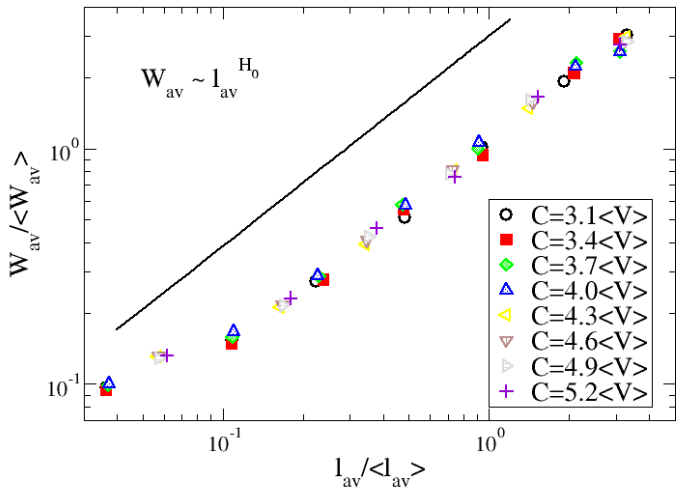


FIGURE 6.11 – *Moyenne des longueurs l_{av} en fonction des largeurs w_{av} d'avalanches d'une dislocation coin dans une solution solide de Ni(Al) contenant* 10% *d'aluminium à une température de* 5K. *La dislocation est soumise à une contrainte de $\tau_{app} = 158$ MPa proche de la contrainte critique. Les symboles correspondent aux résultats de simulations pour plusieurs seuillages C de détection d'avalanches par rapport à la vitesse moyenne de la dislocation $< V >$. Le meilleur ajustement des données de simulation sur une loi de puissance est représenté par la droite dont la pente mesure l'exposant H.*

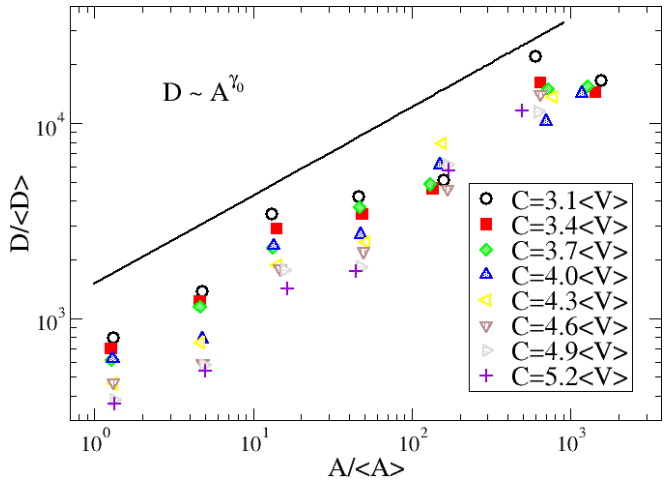


FIGURE 6.12 – *Moyenne des durées D en fonction des surfaces A d'avalanches d'une dislocation coin dans une solution solide de Ni(Al) contenant* 10% *d'aluminium à une température de* 5K. *La dislocation est soumise à une contrainte de $\tau_{app} = 158$ MPa proche de la contrainte critique. Les symboles correspondent aux résultats de simulations pour plusieurs seuillages C de détection d'avalanches par rapport à la vitesse moyenne de la dislocation $< V >$. Le meilleur ajustement des données de simulation sur une loi de puissance est représenté par la droite dont la pente mesure l'exposant γ.*

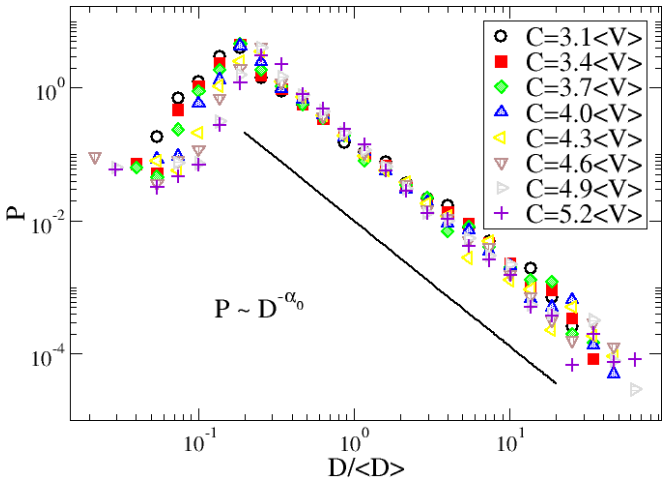


FIGURE 6.13 – *Densité de probabilité P des durées d'avalanches D d'une dislocation coin dans une solution solide de Ni(Al) contenant* 10% *d'aluminium à une température de* 5K. *La dislocation est soumise à une contrainte de* $\tau_{app} = 158$ *MPa proche de la contrainte critique. Les symboles correspondent aux résultats de simulations pour plusieurs seuillages C de détection d'avalanches par rapport à la vitesse moyenne* $< V >$ *de la dislocation. Le meilleur ajustement des données de simulation sur une loi de puissance est représenté par la droite dont la pente mesure l'exposant* α.

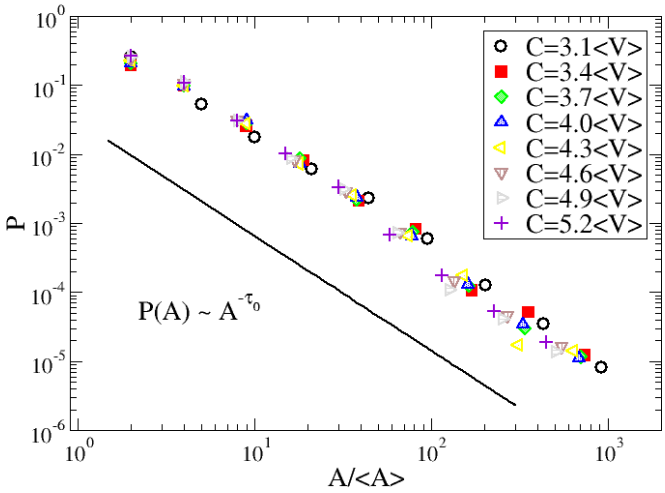


FIGURE 6.14 – *Densité de probabilité P des surfaces d'avalanches A d'une dislocation coin dans une solution solide de Ni(Al) contenant* 10% *d'aluminium à une température de* 5K. *La dislocation est soumise à une contrainte de* $\tau_{app} = 158$ *MPa proche de la contrainte critique. Les symboles correspondent aux résultats de simulations pour plusieurs seuillages C de détection d'avalanches par rapport à la vitesse moyenne* $< V >$ *de la dislocation. Le meilleur ajustement des données de simulation sur une loi de puissance est représenté par la droite dont la pente mesure l'exposant* τ_0.

Table 6.2 – *Résumé des exposants critiques caractérisant les statistiques d'avalanches.*

Exposant	
H_0	0,89
γ_0	0,45
α_0	1,88
τ_0	1,66
ν_0	1,2

Suivant les travaux de Må løy et al. (2006), Bonamy et al. (2008), nous analysons le rapport de forme, la durée et la distribution en taille et temps des avalanches. Les corrélations entre ces quantités sont réalisées pour plusieurs seuillages $C < V >$ par rapport à la vitesse moyenne. Les résultats sont reportés sur les figures 6.11, 6.12, 6.13 et 6.14. Nous observons des dépendances en loi de puissance des paramètres et des distributions d'avalanches traduisant l'absence d'échelle caractéristique pour cette trajectoire proche du seuil de dépiégeage. Les calculs correspondant aux différentes vitesses de seuillage se superposent pour tous les graphiques présentés. Cette propriété nous assure de l'invariance par rapport à une transformation d'échelle qui est caractéristique d'une transition critique. Nous notons néanmoins une corrélation plus pauvre concernant la relation liant la taille des avalanches à leur durée sur le graphique 6.12.
La méthode des cartes d'activité nous fournit un outil simple et puissant pour comprendre la transition de dépiégeage. Elle nous permet de caractériser l'ensemble de la dynamique de la dislocation près de la contrainte d'écoulement. Les exposants calculés au travers de ces relations d'échelle sont reportés dans le tableau 6.2. L'interprétation de ces exposants et leur mise en relation avec les exposants critiques ζ, β et z font l'objet de travaux théoriques en cours (Bonamy 2009).

6.4.3 Transition de phase et limite d'écoulement

Comme nous l'avons décrit précédemment, les systèmes élastiques évoluant dans un désordre gelé répondent à une force extérieure par un état piégé, séparés d'un régime d'écoulement par un seuil de dépiégeage. Près de ce seuil, la dynamique montre des propriétés universelles d'une transition de phase : le mouvement de l'interface élastique se caractérise par des avalanches dont la taille et la durée divergent, les divergences étant contrôlées par des exposants universels (Barabasi et Stanley 1995).

Il est donc particulièrement intéressant d'étudier la distribution des avalanches en fonction de la contrainte appliquée à la dislocation. La contrainte nous sert de paramètre de contrôle pour nous éloigner plus ou moins du seuil de dépiégeage. C'est ce qui a été réalisé sur le graphique 6.15 où nous étudions la distribution statistique des tailles d'avalanches comme sur le graphique 6.14 mais cette fois en fonction de la contrainte appliquée à la dislocation. À partir du graphique 6.15, nous pouvons estimer l'aire limite à partir de laquelle la loi de puissance des distributions n'est plus vérifiée. Cette aire limite traduit la limite de la longueur de cor-

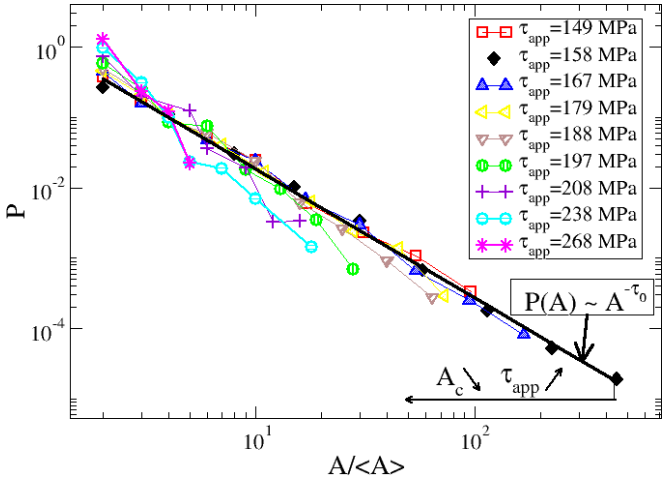


FIGURE 6.15 – *Densité de probabilité P des surfaces d'avalanches A d'une dislocation coin dans une solution solide de Ni(Al) contenant* 10% *d'aluminium à une température de* 5K. *Les symboles correspondent aux résultats de simulations pour plusieurs contraintes appliquées au système* τ_{app} . *La droite (trait continu gras) correspond à la loi de puissance déterminée sur la figure 6.14*

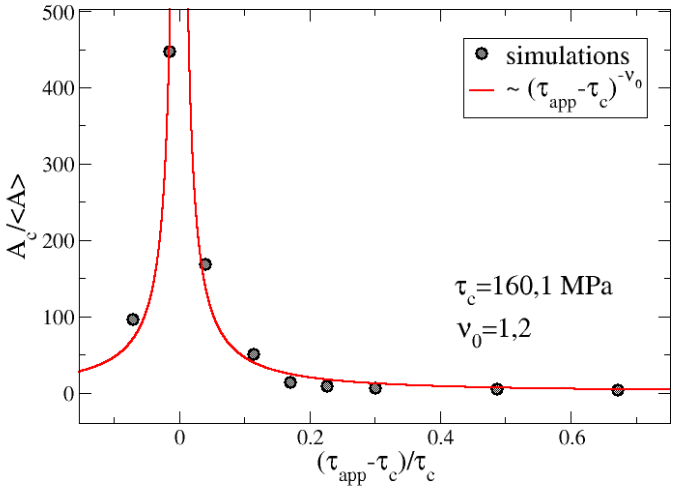


FIGURE 6.16 – *Aire limite* A_c *en fonction de la contrainte appliquée au système* τ_{app}. A_c *est déterminée comme la surface critique jusqu'à laquelle la loi de puissance des distributions de taille de la figure 6.15 est vérifiée. Le meilleur ajustement des données de simulations (cercles) sur une loi de puissance est représenté par une courbe mesurant l'exposant* ν_0.

rélation le long de la dislocation. Les surfaces critiques sont reportées sur 6.16 en fonction de la contrainte appliquée. Elles montrent une divergence de la taille de corrélation des avalanches près du seuil de dépiégeage. Nous confirmons a postériori le choix de la trajectoire correspondant à une contrainte appliquée égale à $\tau_{app} = 158$ MPa pour laquelle la surface critique est la plus élevée. Nous notons finalement que cette transition de phase est également marquée par la divergence de la taille moyenne des avalanches (non montré ici).

Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons étendu l'étude de la dynamique d'une dislocation glissant dans une solution solide au voisinage de la transition de dépiégeage. Nous avons calculé les exposants de rugosité, de croissance et l'exposant dynamique caractérisant la dynamique et la forme de la dislocation dans ce régime critique. Ces exposants nous ont permis d'identifier la classe d'universalité décrivant la propagation d'une dislocation dans un alliage désordonné. Cette dernière correspond au modèle de Percolation Dirigée.
Nous avons décrit le glissement d'une dislocation comme une dynamique d'avalanches à partir de la méthode des cartes d'activité. Les statistiques d'avalanches suivent des lois de puissance dont nous calculons les exposants. L'invariance par rapport à une transformation d'échelle de ces lois de puissance est caractéristique d'une transition critique.
Enfin, nous avons mis en évidence une transition de phase correspondant à la transition de dépiégeage de la dislocation en calculant l'aire limite (corrélé à la longueur de corrélation) des avalanches en fonction de la contrainte appliquée.

Afin de modéliser le DSS, certaines théories de type champ moyen supposent une topologie ad hoc des dislocations ancrées par une population aléatoire de défauts. Le formalisme utilisé dans ce chapitre est donc particulièrement intéressant dans la perspective de développer des modèles théoriques pouvant décrire le durcissement. Il reste néanmoins à calculer le dernier exposant indépendant et à étendre cette étude au cas des dislocations vis ainsi qu'à d'autres concentrations en soluté pour pouvoir confirmer nos observations.

Conclusion générale

Nous avons mis en évidence cinq résultats principaux concernant le Durcissement par Solution Solide (DSS) des métaux Cubiques à Faces Centrées (CFC) :

1. l'identification des origines physiques de l'intensité et de la portée d'interaction entre une dislocation et un atome de soluté ;
2. la modélisation du franchissement par activation thermique d'un atome de soluté par une dislocation ;
3. un DSS analogue des segments de dislocation coin et vis ;
4. le rôle des clusters d'impuretés dans le DSS ;
5. l'identification de la classe d'universalité lors de la transition de dépiégeage d'une dislocation en solution solide.

Notre travail permet de décrire l'interaction entre dislocations et atomes de soluté. Nous avons identifié les origines physiques de l'intensité de l'ancrage d'une dislocation par un atome de soluté en fonction de sa position et de la dislocation partielle avec laquelle il interagit. Pour ce faire, nous avons mis en œuvre des simulations atomistiques statiques d'interaction de dislocation avec des obstacles composés d'atomes de soluté isolé ou de paires d'atomes de soluté dans deux alliages modèles de Ni(Al) et Al(Mg).
Nous avons décrit l'interaction entre les dislocations et les obstacles en calculant leur force d'ancrage et leur portée d'interaction. La force d'ancrage diminue rapidement avec l'éloignement de l'obstacle du plan de glissement. Pour les obstacles éloignés, nous montrons que la description de l'interaction dislocation-obstacle peut être modélisée par la théorie élastique en prenant en compte les effets de taille, de module des solutés ainsi que l'étalement du cœur des dislocations. Pour les obstacles situés au voisinage du plan de glissement, nous avons montré que l'anharmonicité et l'effet Suzuki expliquent qualitativement l'intensité des forces d'ancrage.
Nous avons calculé la portée d'interaction à partir du paysage d'énergie interne ressenti par la dislocation cisaillant un obstacle. Pour les solutés situés dans les plans contigus au plan de glissement, nous relions cette portée d'interaction à l'étalement du cœur des dislocations partielles.

Une fois les interactions statiques dislocation-obstacle caractérisées, nous avons modélisé le franchissement thermiquement activé d'un atome de soluté par une dislocation. Nous avons réalisé des simulations de dynamique moléculaire de dislocation coin et vis poussées contre un atome

de soluté à une contrainte constante dans l'alliage de Ni(Al). Nous avons calculé le temps d'attente moyen avant franchissement de l'obstacle en fonction de la température et de la contrainte appliquée au système.
Les résultats de dynamique moléculaire ont été traités dans le cadre de la théorie de l'état de transition en calculant l'enthalpie d'activation et la fréquence d'attaque effective en fonction de la contrainte appliquée. L'enthalpie d'activation diminue avec la contrainte suivant une loi empirique de Frost et Ashby (1982) tandis que la fréquence d'attaque augmente tout en restant inférieure d'au moins un ordre de grandeur à la fréquence de Debye.
Nous avons reproduit quantitativement la variation de l'enthalpie d'activation calculée par dynamique moléculaire à partir du calcul du travail de la contrainte appliquée et du paysage d'énergie interne obtenu par les simulations statiques. Pour pouvoir mettre en œuvre les théories décrivant la fréquence d'attaque, nous avons calculé les paramètres d'inertie et d'amortissement caractérisant la dynamique d'une dislocation dans une matrice pure. En faisant l'analogie d'une particule oscillant dans un puits de potentiel unidimensionnel, nous avons montré que le problème d'une dislocation franchissant un atome de soluté peut être traité par la théorie d'Eyring. Nous avons alors estimé la fréquence d'attaque effective comme la fréquence harmonique du paysage énergétique unidimensionnel.

Après avoir étudié l'interaction entre une dislocation et un obstacle isolé, nous avons analysé le comportement d'une dislocation dans une solution solide. Cette étude a permis de montrer un accord satisfaisant entre les contraintes critiques d'écoulement calculées et celles observées expérimentalement dans la limite des températures nulles. En outre, nous avons mis en évidence que la contrainte d'écoulement des dislocations coin et vis est du même ordre de grandeur dans les deux alliages de matrices différentes.
Pour ce faire, nous avons calculé la variation de la contrainte d'écoulement en fonction de la concentration en atomes de soluté dans les alliages de Ni(Al) et Al(Mg) pour les dislocations coin et vis. Les calculs de contraintes d'écoulement ont été effectués par des simulations statiques pour lesquelles les dislocations devaient avoir glissé sur une distance minimale de cent nanomètres.

Notre travail a également souligné les limites des théories analytiques du DSS. Nous avons montré que l'hypothèse commune de ces modèles consistant à considérer uniquement les obstacles dans le plan de glissement est pertinente. En revanche, les théories du DSS décrivent la variation de la contrainte d'écoulement seulement qualitativement et ne permettent pas d'expliquer la différence de statistique entre alliages de matrices différentes.
Pour aboutir à cette conclusion, nous avons analysé l'importance de l'ancrage produit par les solutés distribués dans certains plans cristallins. Avec la méthode de simulation statique, nous avons calculé les contraintes critiques de cristaux ne contenant que des solutés dans et en dehors des plans cristallins contigus au plan de glissement. Le calcul de la contrainte d'écoulement des solutions solides modèles, ne contenant des atomes

de soluté que dans les plans contigus au plan de glissement, reproduit à lui seul environ 80% du durcissement d'une solution solide complète. En outre, ce calcul reproduit le taux de durcissement en fonction de la concentration des deux alliages de Ni(Al) et Al(Mg). Nous avons alors comparé de manière rigoureuse la contrainte d'écoulement critique calculée par les simulations atomistiques et celle prédite par les modèles analytiques. La mise en œuvre des théories du DSS a été effectuée sans paramètre ajustable en utilisant les forces d'obstacles, les portées d'interaction et la tension de ligne calculées au préalable.

Un des résultats les plus remarquables de ce travail de thèse réside dans le développement d'un modèle de TL physiquement justifié par les simulations atomistiques. Pour développer le modèle de TL nous avons considéré la dissociation de la dislocation. Les paramètres d'ajustement du modèle sont calculés uniquement pour décrire l'interaction entre un obstacle isolé et une dislocation. Ce modèle a notamment permis de reproduire quantitativement le DSS des deux alliages modèles et de confirmer l'effet des paires de soluté dans le durcissement de l'alliage de Ni(Al) (Proville et al. 2006). Ce résultat souligne la nécessité de décrire le détail de l'interaction non linéaire entre le cœur des dislocations et les obstacles.

Enfin, notre travail a permis d'étendre l'étude de la dynamique d'une dislocation dans une solution solide à basse température. Au voisinage de la transition de dépiégeage, nous avons montré que le comportement de la dislocation suit une classe d'universalité correspondant au modèle KPZ.
Pour étudier la transition de dépiégeage, nous avons réalisé des simulations de dynamique moléculaire de glissement d'une dislocation pour plusieurs contraintes appliquées. Pour la trajectoire proche de la transition critique, nous avons étudié la topologie de la dislocation au cours de son glissement en calculant les exposants critiques de rugosité, de croissance et l'exposant dynamique.
L'étude de la propagation de la dislocation comme une dynamique d'avalanches nous a permis de calculer les exposants caractérisant les statistiques des avalanches. Nous avons mis en évidence la divergence de la longueur de corrélation des avalanches à la transition critique de dépiégeage.

Perspectives

Dans la continuité directe de ce travail de thèse, nous pouvons dégager des orientations de recherches qui permettraient de consolider la modélisation du DSS dans les alliages CFC.

Comme nous l'avons décrit tout au long de ce mémoire, il est nécessaire de prendre en compte la nature non-linéaire de l'interaction entre dislocation et soluté. Il serait donc intéressant d'étendre la théorie élastique et de prendre en compte les effets anharmoniques dans l'interaction entre défaut ponctuel et dislocation. Bien que le formalisme de la théorie élastique en grande déformation soit beaucoup plus lourd, il permettrait de relier le DSS aux propriétés physiques des alliages de manière bien

plus rigoureuse que la théorie élastique linéaire.

Pour décrire de manière quantitative le franchissement thermiquement activé d'un atome de soluté par une dislocation, nous devons approfondir la modélisation de la fréquence d'attaque effective. Les pistes de développement qui pourraient nous permettre de comprendre la variation de la fréquence d'attaque ont été évoquées dans le chapitre 4. Elles pourraient consister à prendre en compte d'autres modes de vibration, à mettre en œuvre des méthodes de recherche de cols d'énergie ou à abandonner l'approximation harmonique. Il serait également intéressant de prolonger ces études en simulant l'interaction entre un soluté et une dislocation possédant une certaine vitesse. L'énergie cinétique de la dislocation ferait alors baisser l'énergie d'activation effective. Cette étude permettrait notamment de tester l'hypothèse d'un effet inertiel pour expliquer l'anomalie des basses températures.

Concernant le DSS, nous disposons à présent d'un modèle de TL capable de reproduire la contrainte d'écoulement calculée par simulations atomistiques. Ces simulations sont néanmoins restreintes aux solutions solides ne contenant des solutés que dans le plan de glissement contigus supérieurs au plan de glissement. Il est nécessaire d'étendre ce modèle aux solutions solides complètes. Ce travail ouvre des perspectives stimulantes dans la mesure où nous pourrions étudier l'influence des paramètres d'interaction élémentaire dislocation-soluté sur le DSS. Étant donné son faible coût de calcul, le modèle de TL nous offre également l'occasion d'étudier les effets de taille finie. Nous pourrions alors comparer de manière plus rigoureuse la modélisation du DSS aux expériences macroscopiques car les vitesses de déformation accessibles dans le modèle de TL peuvent se rapprocher de celles de l'expérience.

Il convient enfin de confirmer l'appartenance de la dynamique d'une dislocation en solution solide à la classe du modèle de KPZ en calculant le dernier exposant critique indépendant. Cette étude pourrait être étendue pour d'autres concentrations d'alliages ainsi qu'aux segments de dislocations vis. L'utilisation des concepts développés dans le cadre de l'étude des objets fractals constitue une piste particulièrement intéressante pour la modélisation du DSS dans la limite thermodynamique.

Annexes : Propriétés des matériaux simulés

A

Sommaire

A.1 Potentiels interatomiques : Méthode de l'Atome Immergé 177
A.2 Propriétés physiques des alliages simulés 178

A.1 Potentiels interatomiques : Méthode de l'Atome Immergé

Les potentiels interatomiques mis en œuvre dans cette thèse utilisent le formalisme de la Méthode de l'Atome Immergé (Daw et Baskes 1984)(EAM, *Embedded Atom Method* en anglais). Cette forme de potentiel est la plus populaire des représentations des liaisons métalliques car prenant en compte la nature à N-corps de la cohésion. Elle permet de reproduire le fait que quand un atome dans un métal perd une liaison, les liaisons restantes sont renforcées. Cette propriété est importante pour pouvoir modéliser les défauts comme les lacunes mal reproduites par les potentiels de paire traitant chaque liaison indépendamment des autres. En outre, les potentiels EAM possèdent une forme fonctionnelle suffisamment simple pour être utilisée dans les simulations pouvant atteindre des millions d'atomes. La forme générale de ces potentiels s'écrit pour un métal t_i pur :

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j / r_{ij} < R_c} \Phi_{t_i t_i}(r_{ij}) + \sum_i F_{t_i}(\bar{\rho}_i) \qquad ; \qquad \bar{\rho}_i = \sum_{i \neq j / r_{ij} < R_c} \rho_{t_i}(r_{ij}), \quad \text{(A.1)}$$

où E est l'énergie interne du système, R_c le rayon de coupure au-delà duquel l'interaction du potentiel est nul. Le premier terme est une somme d'énergie de paires qui représente physiquement l'énergie de répulsion entre ions deux à deux. Le second terme est le terme à N-corps appelé aussi énergie d'immersion. Le gaz d'électrons est représenté par sa densité $\bar{\rho}_i$ calculée à la position de l'atome i. En première approximation, il est égal à la somme des densités électroniques produites à cet endroit par tous les autres atomes. L'énergie du métal est vue comme la somme de l'énergie pour immerger un atome dans la densité électronique locale produite par tous les autres atomes et de l'énergie d'interaction entre noyaux de type électrostatique.
Le formalisme des potentiels EAM permet de passer à un alliage binaire directement. La généralisation de l'énergie donnée par l'équation A.1 à un alliage devient :

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j / r_{ij} < R_c} \Phi_{t_i t_j}(r_{ij}) + \sum_i F_{t_i}(\bar{\rho}_i) \qquad ; \qquad \bar{\rho}_i = \sum_{i \neq j / r_{ij} < R_c} \rho_{t_i}(r_{ij}) \quad \text{(A.2)}$$

où les indices t_i et t_j désignent la nature des atomes considérés. En effet, afin d'exprimer la densité électronique dans laquelle est immergé un atome de nature t_i, le calcul de la densité électronique est fonction du type t_j de chacun de ses voisins et de la distance r_{ij} qui les sépare. La densité électronique totale $\bar{\rho}_i$ ne dépend pas de la nature de l'atome en i. C'est au moment de calculer l'énergie d'immersion que la nature t_i de l'atome intervient. Pour décrire un alliage $A - B$, il est donc nécessaire de disposer des fonctions Φ_{AA}, Φ_{AB}, Φ_{BB}, ρ_A, ρ_B, F_A et F_B. Toutes ces fonctions à l'exception de Φ_{AB} nous sont données par l'expression des métaux purs.

Dans ce mémoire, nous simulons deux alliages CFC de Ni(Al) et Al(Mg). Pour l'alliage de Ni(Al), la partie pure de Ni a été développée

par Angelo et al. (1995), Baskes et al. (1997) et la partie pure de l'Al par Voter et Chen (1987). Le terme croisé Φ_{NiAl} a été ajusté par Rodary et al. (2004). En plus des paramètres ajustés propres à Φ_{NiAl}, Rodary et al. (2004) ont exploité deux caractéristiques de l'expression de l'énergie afin d'introduire de nouveaux paramètres. Ils ont renormalisé la densité électronique et les termes d'immersion des métaux purs afin de disposer de paramètres supplémentaires et pouvoir ajuster au mieux le potentiel sur les propriétés de l'alliage de Ni(Al).

Pour l'alliage de Al(Mg), nous utilisons le potentiel d'Al classique développé par Ercolessi et Adams (1994). La partie relative au soluté de Mg a, quant à elle, été construite par Liu et al. (1996). Liu et al. (1997) ont ajusté le potentiel d'alliage. Au contraire de Ni(Al), ce potentiel est davantage construit sur une base de données obtenue à partir de simulations ab-initio.

Les auteurs attachent de moins en moins d'importance à l'interprétation physique des potentiels EAM et les fonctions Φ, F et ρ sont des fonctions paramétrées, ajustées sur un certain nombre de propriétés (le paramètre de maille, l'énergie de cohésion ou les constantes élastiques parfois jusqu'au troisième ordre (Chantasiriwan et Milstein 1998)) afin que les potentiels reproduisent les propriétés visées.

A.2 Propriétés physiques des alliages simulés

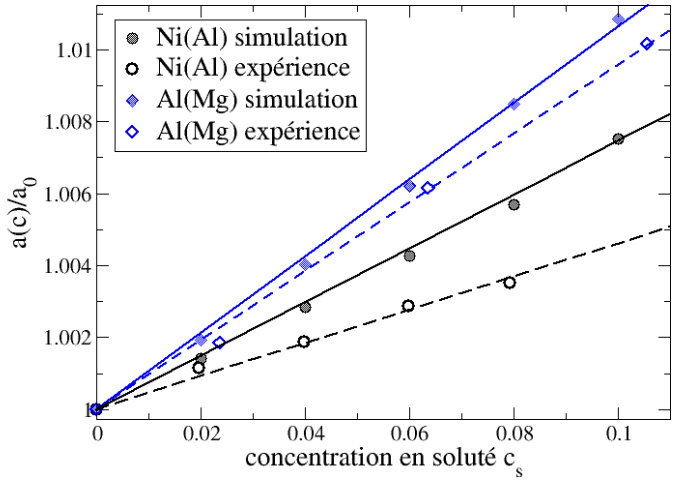


Figure A.1 – *Paramètre de maille normalisé en fonction de la concentration en soluté pour les solutions solides de Ni(Al) (cercles) et Al(Mg) (losanges). Les simulations (symboles pleins) correspondent aux potentiels empiriques utilisés dans ce mémoire et les expériences (symboles ouverts) aux données expérimentales (Person 1958, Mishima et al. 1984) extrapolées à une température nulle. Les droites représentent les ajustements linéaires des données suivant la loi de Vegard (1921).*

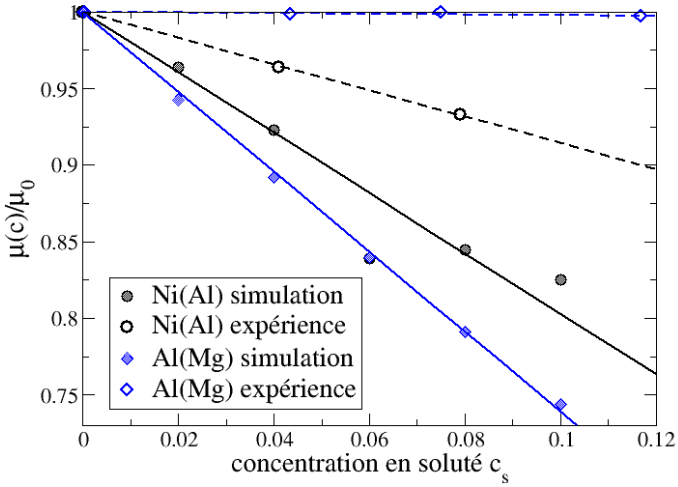


FIGURE A.2 – *Module de cisaillement des plans* (111) *normalisé en fonction de la concentration en solutés pour les solutions solides de Ni(Al) (cercles) et Al (Mg) (losanges). Les simulations (symboles pleins) correspondent aux potentiels empiriques utilisés dans ce mémoire. Les données expérimentales (symboles ouverts) reportées pour l'alliage de Ni(Al) (Pottebohm et al. 1983) sont extrapolées à une température nulle. Les données relatives à l'alliage d'Al(Mg) (Gault et al. 1977) sont réalisées à température ambiante. Les droites représentent les ajustements linéaires des données.*

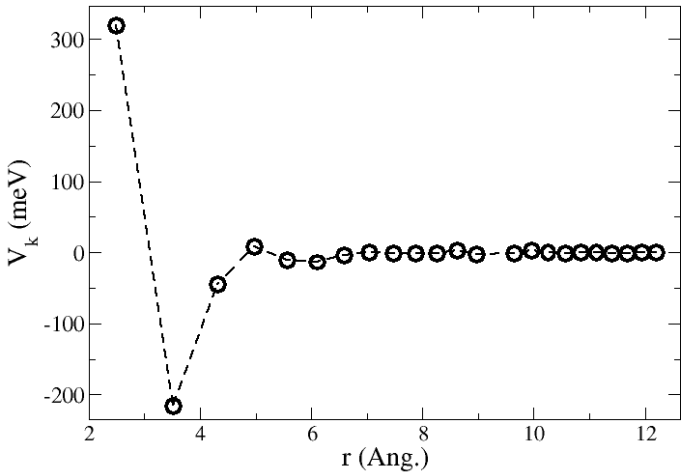


FIGURE A.3 – *Énergie de paire effective de deux atomes d'aluminium dans une matrice de nickel pure en fonction de la distance entre atomes d'Al.*

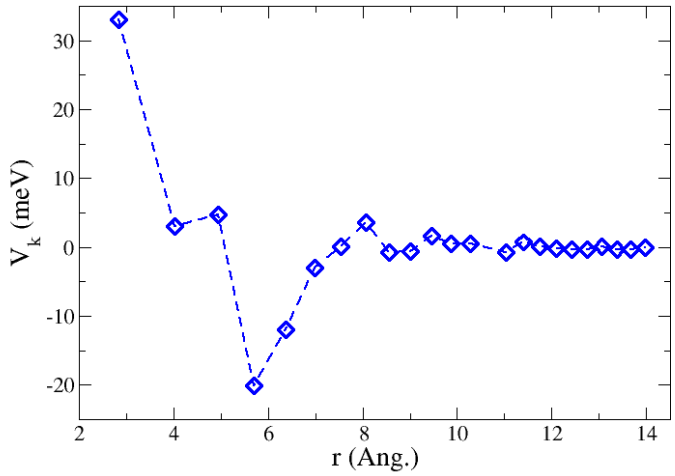


FIGURE A.4 – *Énergie de paire effective de deux atomes de magnésium dans une matrice d'aluminium pure en fonction de la distance entre atomes de Mg.*

TABLE A.1 – *Résumé des propriétés physiques des alliages simulés suivant les notations utilisées dans ce mémoire.*

Propriété	Ni	Ni(Al)	Al	Al(Mg)
a (Å)	3.52		4.032	
b (Å)	2.49		2.851	
$\partial a/a_0 \partial c$		0.074		0.106
E_{coh} (eV)	4.45		3.36	
C_{11} (GPa)	246.28		118.12	
C_{12} (GPa)	147.32		62.57	
C_{44} (GPa)	124.77		36.68	
$\mu_{(111)}$ dans le plan $(1\bar{1}1)$ (GPa)	74.576		30.743	
ν_{Voigt}	0.276		0.32	
$\partial \mu/\mu_0 \partial c$		-1.97		-2.6
γ_0 (mj/m^2)	89		104	
$\partial \gamma/\gamma_0 \partial c$		-7.65		-2.44

Annexes : Effets de tailles et synthèse des obstacles

B

Sommaire

B.1 Effets de tailles finies 183
B.1.1 Effets des dimensions du système perpendiculaires à la ligne de dislocation 183
B.1.2 Effets des dimensions du système le long de la ligne de dislocation 187
B.2 Coefficients d'interaction des obstacles étudiés 192
B.2.1 Géométries des obstacles étudiés 192
B.2.2 Coefficients d'interaction des obstacles étudiés 194

B.1 Effets de tailles finies

B.1.1 Effets des dimensions du système perpendiculaires à la ligne de dislocation

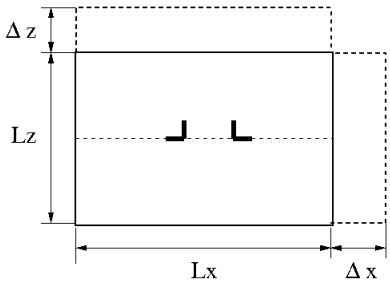


Figure B.1 – *Effets de taille finie des dimensions du système perpendiculaires à la ligne de dislocation L_x et L_z.*

Energie de ligne d'une dislocation en fonction de L_x et L_z

Les effets des conditions aux limites peuvent être modélisés comme la conséquence d'un réseau infini de dislocations de même signe dans la direction x et de signe alterné dans la direction z, comme schématisé sur la figure B.2 (Saada et al. 2004). Il est alors possible de calculer les variations d'énergie potentielle via la théorie élastique en fonction de la forme de la boîte de simulation. Le calcul de l'énergie associée est toutefois délicat et nécessite des techniques de régularisation des champs élastiques. En effet, Cai et al. (2003) ont montré que, du fait de l'interaction à longue portée, la série des termes d'énergie d'un réseau de dislocations alternées ne converge que de façon conditionnelle. Nous présentons simplement sur les figures B.3 et B.4 les tendances que nous observons dans notre système. Du fait de l'alternance des signes des dislocations images créées par les surface libres, les variations d'énergie peuvent être décrites au premier ordre comme provenant d'un dipôle de dislocations séparées d'une distance L_z.

Effet de L_x sur la force d'obstacle

Nous observons que plus l'énergie élastique du système est faible, plus le cœur des dislocations partielles s'étale dans le plan de glissement comme reporté sur la figure B.5. Yao et al. (1999) ont développé une expression analytique des champs de déplacement pour les arrangements périodiques de dislocations de type P-N. Les ajustements réalisés à partir de la formule de Yao et al. (1999) donnent des résultats similaires à ceux obtenus par l'équation 2.3 pour les grandes tailles de systèmes suivant L_X. Pour les petites tailles de boîtes de simulation le modèle de Yao et al. (1999) décrit bien une condensation des cœurs des dislocations en accord avec les géométries obtenues dans nos simulations.
Nous observons une augmentation de la force d'obstacle avec la diminution de L_X comme reporté sur la figure B.6. La variation de l'étalement des cœurs de dislocation induit celle des forces d'obstacle. En effet, plus les cœurs sont compacts, plus les champs de déplacement sont

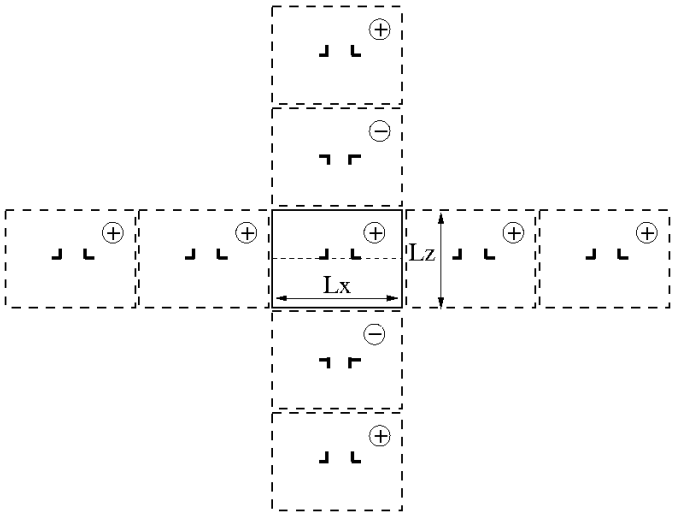


FIGURE B.2 – *Effets des conditions aux limites périodiques imposées perpendiculairement à la ligne de dislocation. Le système simulé est équivalent à un réseau infini et régulier de dislocations de mêmes signes suivant x et de signes alternés suivant z.*

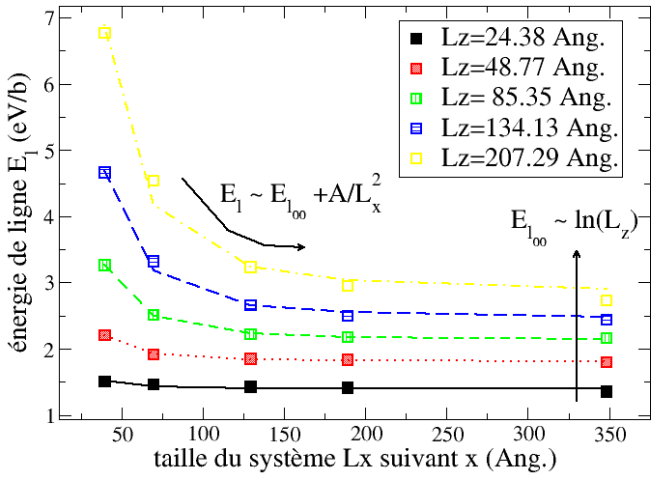


FIGURE B.3 – *Énergie de formation ou énergie de ligne d'une dislocation vis E_l^v dans le nickel pur en fonction de la taille du système simulé dans la direction de glissement L_x. Les courbes correspondent aux ajustements des résultats de simulations (symboles) pour plusieurs épaisseurs de boîte L_z suivant les tendances prédites par la théorie élastique au premier ordre spécifiées sur le graphique.*

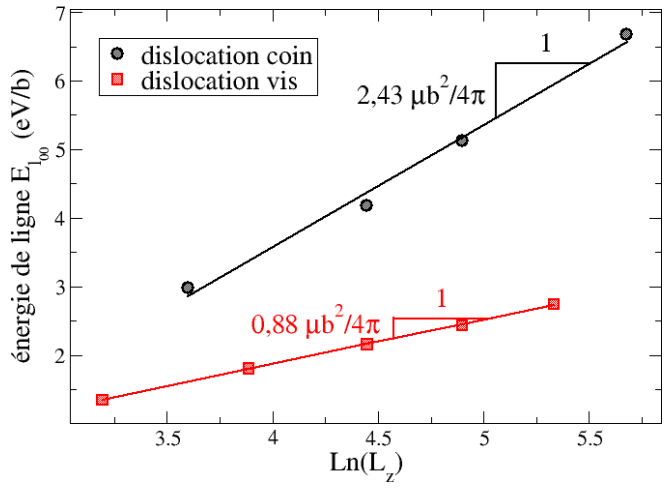


FIGURE B.4 – *Énergie de formation $E_{l\infty}$ des dislocations coin (cercles) et vis (carrés) dans le nickel pur en fonction du logarithme de l'épaisseur de boîte simulée $ln(L_z)$. $E_{l\infty}$ obtenu par simulation (symboles) pour de grandes tailles de systèmes suivant la direction de glissement L_x est comparé à un ajustement linéaire (traits continus).*

intenses et singuliers, conduisant à une augmentation des interactions soluté-dislocation.

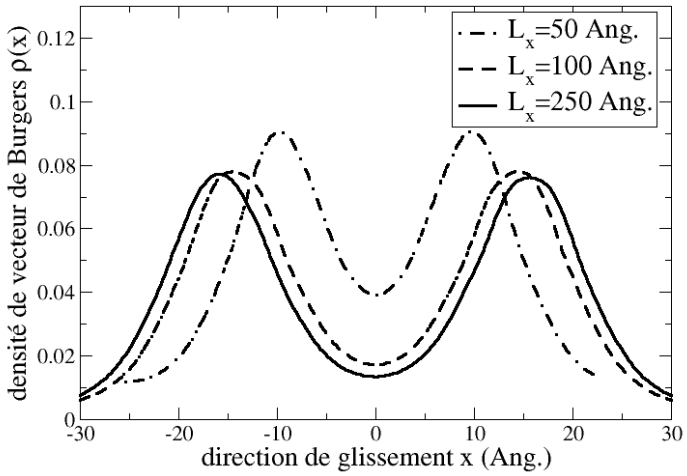


FIGURE B.5 – *Géométrie des cœurs de dislocation dans le plan de glissement : densité de vecteur de Burgers $\rho = dD(x)/dx$ à travers le plan de glissement en fonction de la position dans la direction de glissement x pour une dislocation coin dans le nickel pur. Les courbes correspondent aux simulations pour plusieurs tailles du système dans la direction de glissement : $L_x = 50$Å(pointillé discontinu), 100Å(discontinu) et 250Å(continu).*

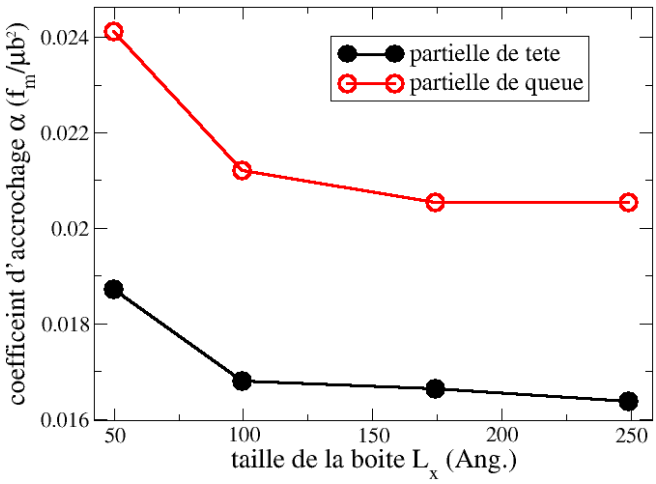


FIGURE B.6 – *Coefficient d'accrochage α d'une dislocation coin dans une matrice de nickel en fonction de la taille de la cellule de simulation dans la direction de glissement L_x. L'obstacle est formé par une paire d'atomes d'aluminium premiers voisins située dans le plan au-dessus du plan de glissement (c.f. obstacle B.16 dans le tableau B.1).*

B.1.2 Effets des dimensions du système le long de la ligne de dislocation

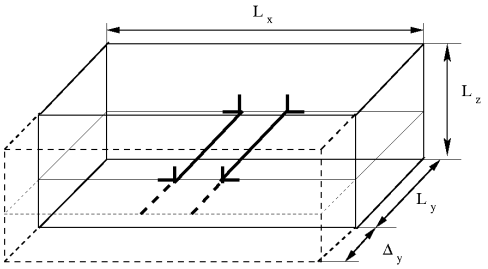


FIGURE B.7 – *Effets de taille finie de la dimension du système dans la direction de la ligne de dislocation L_y.*

Effet de L_y sur le calcul de la force d'ancrage d'un obstacle

Dans cette section, nous exemplifions l'effet de taille finie en considérant le cas d'un atome de Mg situé dans le plan contigu au-dessus du plan de glissement cisaillé par une dislocation vis.

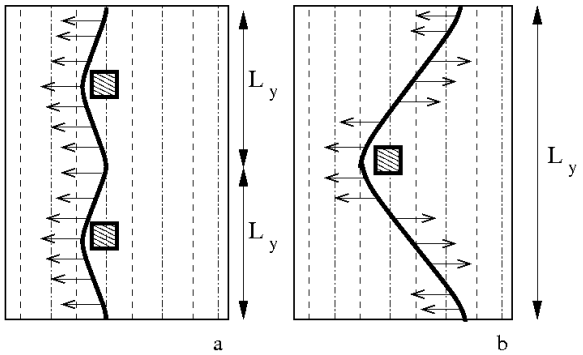


FIGURE B.8 – *Dislocation ancrée à la contrainte critique sur une chaîne régulièrement espacée d'atomes de soluté, pour (a) une petite et (b) une grande boîte de simulation suivant y. Pour les petites longueurs L_y la dislocation est quasiment droite et reste dans une seule vallée de Peierls. Pour les grandes longueurs L_y la dislocation se courbe et franchit plusieurs vallées de Peierls (symbolisées par les traits verticaux discontinus).*

À la contrainte critique, l'équilibre des forces s'exerçant sur la dislocation s'écrit :

$$\tau_c b L_y = f_m + \tau_p^{eff} b L_y, \tag{B.1}$$

où dans le membre de droite nous reconnaissons la force d'obstacle f_m et l'effet du potentiel de Peierls pour lequel nous introduisons une contrainte de Peierls effective τ_p^{eff} dépendant du profil critique de la dislocation. Si la dislocation croise plusieurs vallées de Peierls, nous pouvons nous attendre à obtenir une contrainte τ_p^{eff} proche de zéro comme représenté sur la figure B.8. Pour une dislocation croisant peu de vallées de Peierls, la configuration critique peut se situer majoritairement sur la partie ascendante (descendante) du potentiel de Peierls et par conséquent augmenter (diminuer) τ_c. Dans l'équation B.1, nous avons donc $-\tau_p < \tau_p^{eff} < \tau_p$ avec les deux bornes correspondant aux deux cas limites d'une dislocation

poussée ou retenue par τ_p sur toute sa longueur.
Pour calculer les profils des dislocations à la contrainte critique τ_c, nous utilisons la solution développée dans le chapitre 2 pour laquelle nous avons calculé la tension de ligne effective. La forme de la dislocation sous une contrainte appliquée τ_{app} est donnée par l'équation 2.13 sous la forme $x(y) = f(y, \tau_{app})$ en fonction de la position y le long de la ligne de dislocation. Dans le cas d'un soluté isolé, la dislocation se courbe peu car la contrainte de Peierls influe sur la forme des dislocations ancrées. À la contrainte critique, la comparaison des profils de dislocation calculés par simulation atomistique avec $x(y) = f(y, \tau_c)$ montre que la modélisation continue surestime notablement la flexion des dislocations pour les grandes distances inter-obstacles L_y. Dans ce cas, contrairement aux simulations atomistiques, la dislocation traverse plusieurs vallées de Peierls même pour des contraintes critiques faibles correspondant à un atome de soluté isolé. Pour corriger cet effet, nous pouvons prendre en compte au premier ordre la contrainte de Peierls en modélisant le profil de la dislocation par $x(y) = f(y, \tau_c - \tau_p)$. En dépit de l'hypothèse forte d'une contrainte $\tau_{app} = \tau_c - \tau_p$ constante le long de la dislocation, cette modélisation montre des courbures de dislocation en bien meilleur accord avec les simulations atomistiques pour les grandes longueurs L_y.

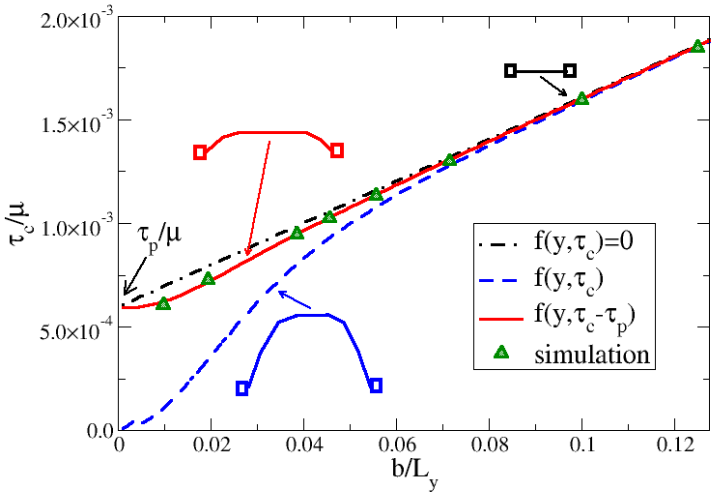


FIGURE B.9 – *Contrainte critique statique normalisée en fonction de l'inverse de la distance inter-obstacles normalisée. Les symboles correspondent aux résultats de simulation de franchissement d'un atome de magnésium par une dislocation vis dans l'aluminium. Les courbes correspondent aux différentes modélisations de la variation de la contrainte critique suivant la forme prise par la dislocation ancrée : dislocation droite (pointillée discontinue), dislocation fortement courbée (discontinue) et dislocation faiblement courbée prenant en compte la force de Peierls (continue).*

Sur la figure B.9 nous reportons les résultats du calcul de la contrainte critique d'une dislocation vis franchissant un soluté de Mg dans l'Al. Pour les segments de dislocation courts, les résultats de simulations sont correctement décrits en utilisant $\tau_p^{eff} = \tau_p$ comme développé dans le chapitre 3. C'est ce qui nous permet le calcul de la force d'obstacle f_m. Pour les

grandes tailles de dislocation, le résultat des simulations dévie de la relation linéaire entre τ_c et l'inverse de L_y. Afin de rendre compte de cet effet, nous supposons que le potentiel de Peierls peut être approximé par une fonction cosinus comme $V(x) = \tau_p b a'(1 - \cos(2\pi y/a'))/2\pi$ et que le profil de la dislocation peut être déterminé par l'équation 2.13. τ_p^{eff} résulte alors de la somme de la friction de réseau le long de la dislocation courbée :

$$\tau_p^{eff} L_y = \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \tau_p b \sin(2\pi x(y)/a') dy. \tag{B.2}$$

Nous réalisons le calcul de cette intégrale numériquement lequel nous donne accès à τ_c en fonction de la taille du système L_y. Les résultats de ce calcul réalisé pour différentes formes de dislocations sont comparés aux simulations sur la figure B.9. Pour une forme de dislocation décrite par $x(y) = f(y, \tau_c)$, il est clair que les résultats de simulations sont sous-estimés. À mesure que $L_y = \infty$, la dislocation traverse plusieurs vallées de Peierls et τ_c s'annule. En revanche, pour les profils de dislocation décrits par $x(y) = f(y, \tau_c - \tau_p)$, nous reproduisons de manière satisfaisante la variation de τ_c avec L_y. Nous soulignons qu'aucun paramètre ajustable n'a été introduit dans le calcul de τ_c étant donné que f_m et τ_p ont été calculés dans des simulations indépendantes. Cet effet de taille finie s'accroît avec τ_p, aussi il reste faible pour les dislocations de caractère coin comme présenté dans le chapitre 3. L'approche développée ici peut présenter un certain intérêt pour les segments de dislocation vis des alliages CC possédant une contrainte de Peierls bien plus élevée.

Effet de L_y sur la contrainte critique de glissement en solution solide

Dans le cadre du durcissement par solution solide, les effets de taille finie sont essentiellement de nature statistique. Un exemple d'effet statistique réside dans la diminution de la contrainte d'écoulement d'une dislocation avec l'augmentation de sa longueur de ligne. Inversement, l'augmentation du parcours de la dislocation conduit à l'augmentation de la contrainte critique du fait de l'accroissement de la probabilité pour la dislocation de rencontrer une position stable. Ces effets ont été modélisés et comparés à des simulations de tension de ligne par Arsenault et al. (1989b), Nogaret et Rodney (2006), Proville (2009). Ici nous présentons l'effet de l'augmentation de la longueur du système dans la direction de la ligne de dislocation comme reporté sur les figures B.10, B.11, B.12 et B.13 pour les deux alliages et les deux types de dislocations. Nous interprétons simplement la décroissance de la contrainte d'écoulement τ_c à partir du phénomène critique de dépiégeage présenté dans le chapitre 6. Par définition, la contrainte d'écoulement que nous calculons correspond à la transition de dépiégeage pour laquelle la longueur de corrélation des avalanches l_{av} diverge comme

$$l_{av} \sim (\tau_{app} - \tau_c)^{-\nu}. \tag{B.3}$$

En inversant cette expression et en considérant que la longueur de corrélation atteint la taille de notre système L_y nous obtenons :

$$\tau_{app} = \tau_c + \frac{A}{L_y^{1/\nu}}, \tag{B.4}$$

où A est une constante définie positive. Nous notons que les ajustements de l'équation B.4 sur les résultats des figures B.10, B.11, B.12 et B.13 donnent un exposant ν en accord qualitatif avec l'exposant des modèles de Percolation Dirigée.

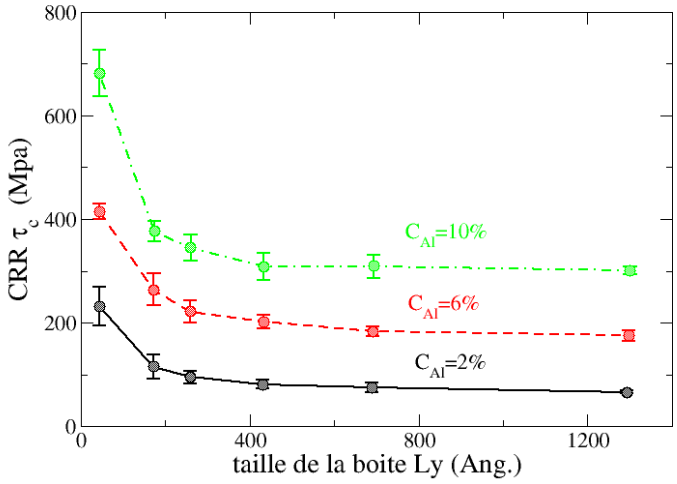


FIGURE B.10 – *Contrainte critique résolue de glissement τ_c d'une dislocation coin dans une solution solide de Ni(Al) en fonction de la taille du système dans la direction de la ligne de dislocation, L_y, pour plusieurs concentrations en Aluminium : $c_{Al} = 2$ (continue), 6 (discontinue) et 10% (pointillée discontinue).*

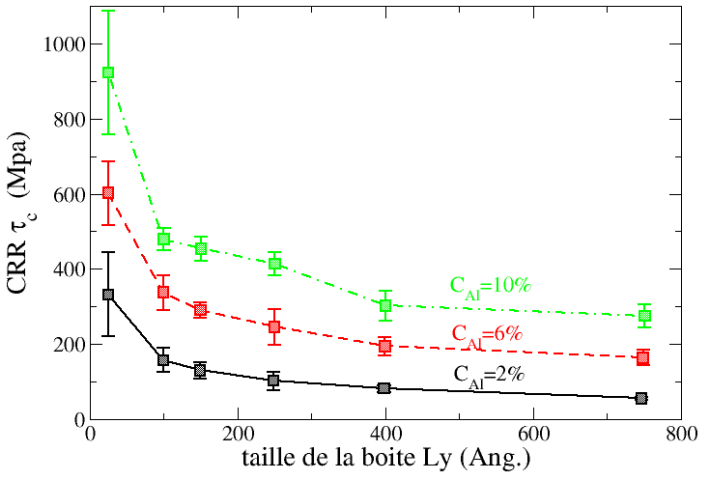


FIGURE B.11 – *Même graphique que B.10 pour une dislocation vis dans une solution solide de Ni(Al).*

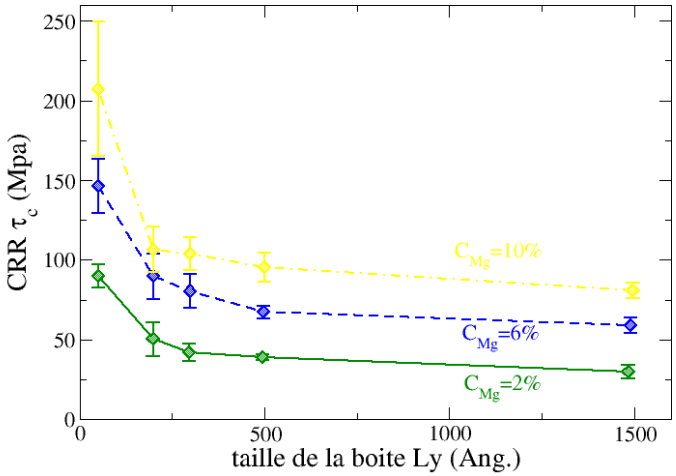


FIGURE B.12 – *Même graphique que B.10 pour une dislocation coin dans une solution solide d'Al(Mg).*

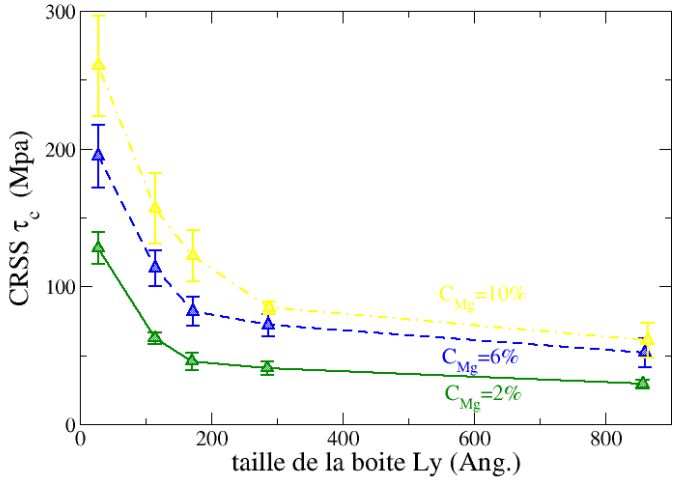


FIGURE B.13 – *Même graphique que B.10 pour une dislocation vis dans une solution solide d'Al(Mg).*

B.2 Coefficients d'interaction des obstacles étudiés

B.2.1 Géométries des obstacles étudiés

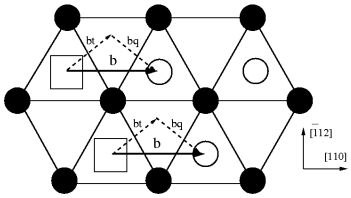


Figure B.14 – *c*

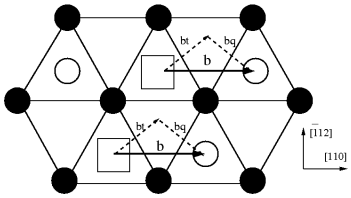


Figure B.15 – *d*

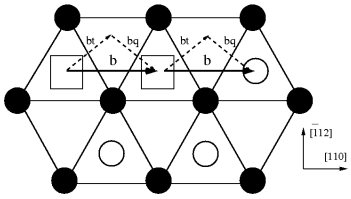


Figure B.16 – *e*

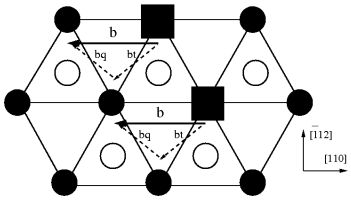


Figure B.17 – *f*

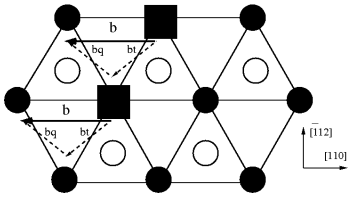


Figure B.18 – *g*

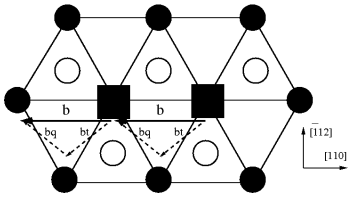


Figure B.19 – *h*

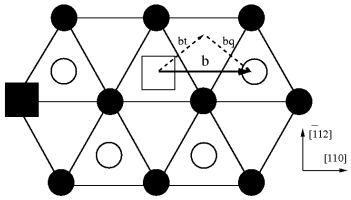


Figure B.20 – *i*

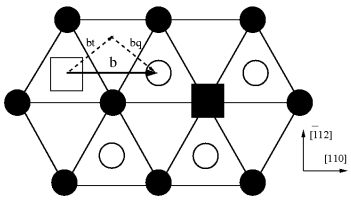


Figure B.21 – *j*

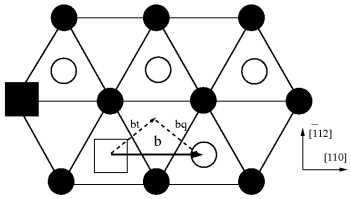


Figure B.22 – *k*

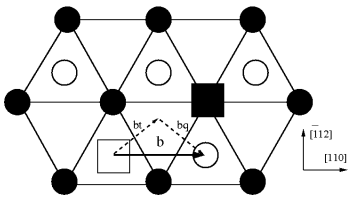


Figure B.23 – *l*

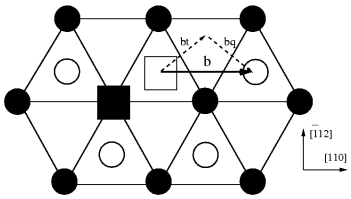


Figure B.24 – *n*

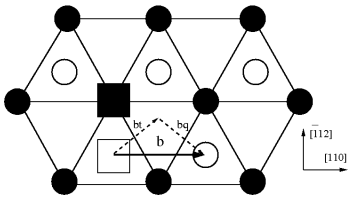


Figure B.25 – *o*

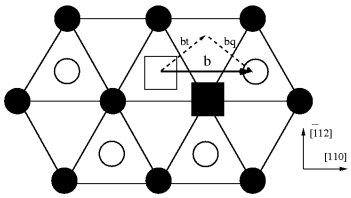


Figure B.26 – *p*

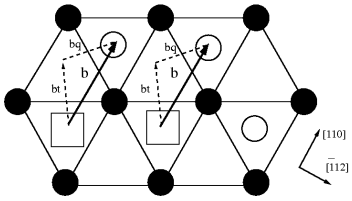


FIGURE B.27 – *c*

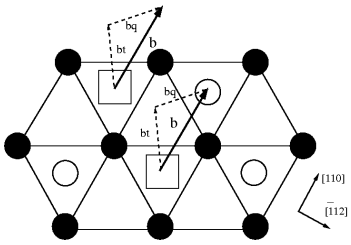


FIGURE B.28 – *d*

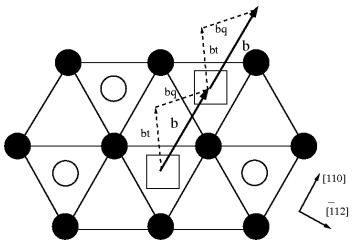


FIGURE B.29 – *e*

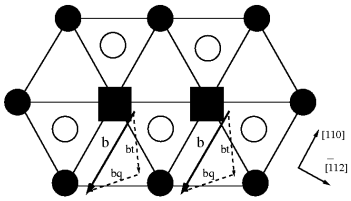


FIGURE B.30 – *f*

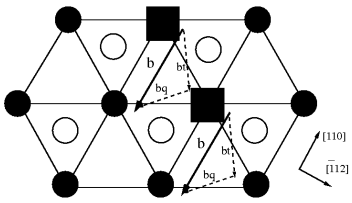


FIGURE B.31 – *g*

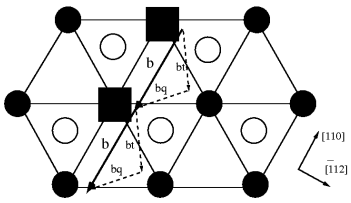


FIGURE B.32 – *h*

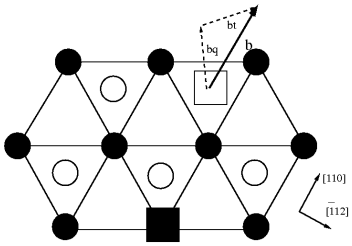


FIGURE B.33 – *i*

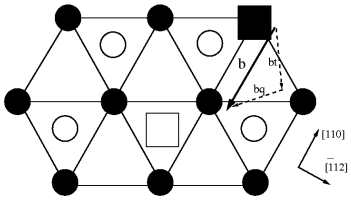


FIGURE B.34 – *j*

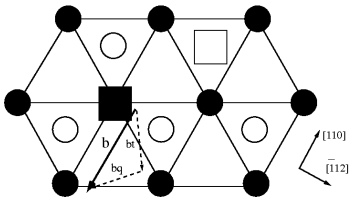


FIGURE B.35 – *k*

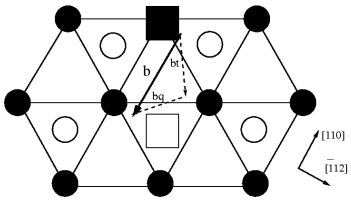


FIGURE B.36 – *l*

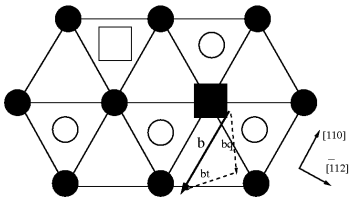


FIGURE B.37 – *m*

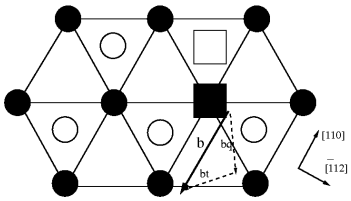


FIGURE B.38 – *n*

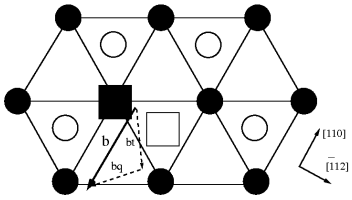


FIGURE B.39 – *o*

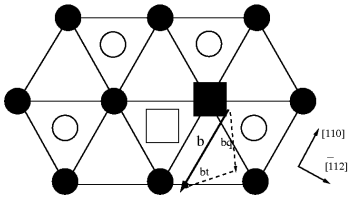


FIGURE B.40 – *p*

B.2.2 Coefficients d'interaction des obstacles étudiés

Table B.1 – *Synthèse des différents accrochages pour les dislocations partielles de tête (indice t) et de queue (indice q) pour les dislocations coin et vis dans l'alliage de Ni(Al). Les orientations des paires de solutés, les coefficients d'accrochages α et la portée d'interaction w sont spécifiés pour chaque type d'obstacle.*

			Coin		Vis	
Type	Texte ref.	orien. paire	α_l et w_l	α_t et w_t	α_l et w_l	α_t et w_t
Soluté isolé	(a)		0.0058/1.2b	0.0089/1.8b	0.0018/1.1b	0.0110/0.9b
	(b)		0.0010/2.0b	0.0040/3.0b	0.0086/1.1b	0.0057/2.2b
Paire 1er	(c)	[011]	0.0090/2.4b	0.0195/3.6b	0.0022/0.8b	0.0258/2.2b
voisin non-	(d)	[10$\bar{1}$]	0.0145/2.3b	0.0148/2.7b	0.0003/0.1b	0.0132/1.5b
croisante	(e)	[110]	0.0169/2.4b	0.0209/3.6b	0.0033/1.0b	0.0158/1.4b
	(f)	[011]	0.0006/0.6b	0.0055/2.5b	0.0082/0.7b	0.0084/2.8b
	(g)	[10$\bar{1}$]	0.0000/0.6b	0.0059/7.7b	0.0207/1.8b	0.0070/2.0b
	(h)	[110]	0.0020/1.6b	0.0063/1.7b	0.0154/1.1b	0.0103/2.3b
Paire 3ème	(i)	[721]	0.0014/1.b	0.0084/3.5b	0.0099/1.2b	0.0140/2.5b
voisin	(j)	[211]			0.0026/0.4b	0.0206/2.1b
croisante	(j′)	[27$\bar{1}$]	0.0000/2.b	0.0166/3.3b		
Paire 2ème	(k)	[212]	0.0081/1.2b	0.0085/7.3b	0.0142/1.2b	0.0139/2.4b
voisin	(l)	[$\bar{1}\bar{2}$2]	0.0119/3.1b	0.0149/4.b	0.0191/2.9b	0.0225/2.4b
croisante	(m)	[2$\bar{2}\bar{1}$]			0.0096/1.1b	0.0146/1.7b
Paire 1er	(n)	[4$\bar{1}$1]	0.0000/0.7b	0.0158/2.4b	0.0000/1.9b	0.0147/1.9b
voisin	(o)	[1$\bar{1}$4]	0.0132/2.4b	0.0000/3.6b	0.0178/1.9b	0.0035/1.4b
croisante	(p)	[1$\bar{4}$1]	0.0122/2.5b	0.0166/3.7b	0.0226/2.8b	0.0153/1.4b

Table B.2 – *Synthèse des différents accrochages pour les dislocations partielles de tête (indice t) et de queue (indice q) pour les dislocations coin et vis dans l'alliage de Al(Mg). Les orientations des paires de solutés, les coefficients d'accrochages α et la portée d'interaction w sont spécifiés pour chaque type d'obstacle.*

			Coin		Vis	
Type	Texte ref.	orien. paire	α_l et w_l	α_t et w_t	α_l et w_l	α_t et w_t
Soluté isolé	(a)		0.0103/5.1b	0.0086/2.16b	0.0000/0.b	0.0102/1.8b
	(b)		0.0020/0.2b	0.0064/3.69b	0.0073/3.b	0.0028/2.4b
Paire 1er	(c)	[011]	0.0170/4.7b	0.0159/2.65b	0.0000/0.b	0.0228/1.7b
voisin non-	(d)	[10$\bar{1}$]	0.0177/5.3b	0.0158/1.95b	0.0000/0.b	0.0224/1.6b
croisante	(e)	[110]	0.0128/5.3b	0.0129/2.15b	0.0000/0.b	0.0228/1.5b
	(f)	[011]	0.0000/0.b	0.0103/3.94b	0.0080/1.5b	0.0051/2.9b
	(g)	[10$\bar{1}$]	0.0000/0.b	0.0122/3.66b	0.0081/1.6b	0.0060/2.8b
	(h)	[110]	0.0000/0.b	0.0082/4.18b	0.0152/2.b	0.0086/2.3b
Paire 3ème	(i)	[721]	0.0062/0.7b	0.0139/2.83b	0.0138/0.7b	0.0026/1.2b
voisin	(j)	[211]			0.0038/1.b	0.0112/1.b
croisante	(j′)	[27$\bar{1}$]	0.0062/1.8b	0.0145/2.11b		
Paire 2ème	(k)	[212]	0.0100/1.1b	0.0099/2.96b	0.0045/0.7b	0.0110/0.6b
voisin	(l)	[$\bar{1}\bar{2}$2]	0.0102/1.9b	0.0103/1.86b	0.0064/1.b	0.0062/0.9b
croisante	(m)	[2$\bar{2}\bar{1}$]			0.0064/1.b	0.0025/1.8b
Paire 1er	(n)	[4$\bar{1}$1]	0.0067/2.9b	0.0120/2.59b	0.0043/1.1b	0.0119/0.6b
voisin	(o)	[1$\bar{1}$4]	0.0061/1.1b	0.0086/2.93b	0.0054/0.7b	0.0141/1.1b
croisante	(p)	[1$\bar{4}$1]	0.0065/1.2b	0.0106/1.83b	0.0032/0.8b	0.0033/0.9b

Bibliographie

A. T. Adorno, W. Garlipp, M. Cilense, et R. A. G. Silva. *J. Alloys Comp.*, 414 :55, 2006. (Cité page 88.)

A. Akhtar et E. Teghtsoonian. *Phil. Mag.*, 25 :897, 1972. (Cité pages 23, 28 et 35.)

G. A. Alers, O. Buck, et B. R. Tittmann. *Phys. Rev. Lett.*, 23 :291, 1969. (Cité page 24.)

V.I. Alshits. *Modern Problems in Condensed Matter Sciences*. Elsevier Science, North-Holland, 1992. 625. (Cité pages 112 et 115.)

L. A. N. Amaral, A.-L. Barabási, S. V. Buldyrev, S. T. Harrington, S. Havlin, R. Sadr-Lahijany, et H. E. Stanley. *Phys. Rev. E*, 51 :4655, 1995. (Cité pages 162 et 163.)

J.E. Angelo, N. R. Moody, et M. I. Baskes. *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 3 :289, 1995. (Cité pages 45 et 178.)

A. S. Argon. *Strengthening mechanisms in crystal plasticity*. Oxford University Press, Oxford, New York, 2007. (Cité pages 21, 23, 33, 35, 77 et 127.)

R. J. Arsenault, S. Patu, et D. M. Esterling. *Metallurgical Transactions A*, 20 : 1411, 1989a. (Cité pages 37, 125 et 139.)

R. J. Arsenault, S. Patu, et D. M. Esterling. *Metallurgical Transactions A*, 20 : 1419, 1989b. (Cité pages 37 et 189.)

R.J. Arsenault et S. Li. *Metallurgical Transactions A*, 20 :1419, 1989. (Cité page 37.)

R. A. Ayeres. *Metall. Trans. A*, 10 :849, 1979. (Cité page 14.)

D. J. Bacon, U. F. Kocks, et R. O. Scattergood. *Phil. Mag.*, 28 :1241, 1973. (Cité page 85.)

D.J. Bacon et Yu. N. Osetsky. *JOM*, 59 :40, 2007. (Cité page 39.)

B. Bako, D. Weygand, M. Samaras, J. Chen, M. A. Pouchon, P. Gumbsh, et W. Hoffelner. *Phil. Mag.*, 87 :3645, 2007. (Cité pages 37 et 132.)

B. Bakó, D. Weygand, M. Samaras, W. Hoffelner, et M. Zaiser. *Phys. Rev. B*, 78 :144104, 2008. (Cité page 160.)

A.-L. Barabasi et H. E. Stanley. *Fractal Concepts in Surface Growth*. Cambridge University Press, 1995. (Cité pages 158, 159 et 167.)

D. M. Barnett, G. Wong, et W. D. Nix. *Acta Metall.*, 30 :2035, 1982. (Cité page 80.)

Z. S. Basinski. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, 240 :229, 1957. (Cité page 24.)

M.I. Baskes, Xianwei Sha, J.E. Angelo, et N.R. Moody. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 5 :651, 1997. (Cité pages 45 et 178.)

H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren, A. Dinola, et J. R. Haak. *J. Chem. Phys.*, 81 :3684, 1984. (Cité pages 111 et 156.)

E. Bitzek et P. Gumbsch. *Mater. Sci. Eng. A*, 387 :11, 2004. (Cité pages 112 et 114.)

E. Bitzek et P. Gumbsch. *Mater. Sci. Eng. A*, 400 :40, 2005. (Cité pages 112 et 114.)

E. Bitzek, P. Koskinen, F. Gähler, M. Moseler, et P. Gumbsch. *Phys. Rev. Lett.*, 97 :170201, 2006. (Cité page 47.)

D. Bonamy. *J. Phys. D : Appl. Phys*, 2009. À paraître. (Cité page 167.)

D. Bonamy, S. Santucci, et L. Ponson. *Phys. Rev. Lett.*, 101 :045501, 2008. (Cité page 164.)

O Boser. *Met. Trans*, 3 :843, 1972. (Cité pages 24 et 26.)

O. Boser. *J. Appl. Phys.*, 44(3) :1033, 1973a. (Cité page 25.)

O. Boser. *Journal of Applied Physics*, 44(3), 1973b. (Cité pages 34 et 77.)

A. Brailsford. volume 2. Springer-Verlag, Berlin, 1975. (Cité page 112.)

D. Brailsford. Pergamon, Oxford, 1981. (Cité page 112.)

E. H. Brandt. *Phys. Rev. Lett.*, 56 :13, 1986. (Cité page 29.)

V. V. Bulatov et Wei Cai. Oxford University Press, 2006. (Cité page 59.)

V. V. Bulatov et E. Kaxiras. *Phys. Rev. Lett.*, 78 :4221, 1997. (Cité page 63.)

S. V. Buldyrev, A.-L. Barabási, F. Caserta, S. Havlin, H. E. Stanley, et T. Vicsek. *Phys. Rev. A*, 45(12) :R8313, 1992. (Cité page 162.)

R. Bullough et R. C. Newman. *Phil. Mag.*, 7 :529, 1962. (Cité page 77.)

R. Bullough et J. R. Willis. *Phil. Mag.*, 31 :855, 1975. (Cité page 77.)

M. Z. Butt et P. Feltham. *International Quarterly Scientific Review Journal*, 3 : 99, 1978. (Cité page 21.)

M. Z. Butt et P. Feltham. *Phys. Stat. Sol. A*, 60 :167, 1980. (Cité pages 31 et 88.)

M. Z. Butt et P. Feltham. *J. Mater. Sci.*, 28 :2557, 1993. (Cité pages 21, 23 et 31.)

M. Z. Butt, P. Feltham, et I. M. Ghauri. *J. Mater. Sci.*, 21 :2664, 1986. (Cité page 22.)

M. Z. Butt, I M. Ghauri, R. Qamar, K. M. Hashimi, et P. Feltham. *Acta Mettal.*, 29 :829, 1980. (Cité page 28.)

M. Z. Butt, I. M. Ghauri, R. Qamar, K. M. Hashmi, et P. Feltham. *Act. Metall.*, 29 :829, 1981. (Cité page 31.)

C. H. Caceres et D.M. Rovera. *Journal of Light Metals*, 1 :151, 2001. (Cité page 28.)

R.W. Cahn. *Nature*, 410 :643, 2001. (Cité pages 27 et 128.)

W. Cai, V. V. Bulatov, J. Chang, J. LI, et S. YIP. *Phil. Mag.*, 83 :539, 2003. (Cité page 183.)

Wei Cai, Arsenlis A., C. R. Weinberger, et V. V. Bulatov. *J. Mech. Phys. Sol.*, 54 :561, 2006. (Cité page 80.)

D. Caillard et J. L. Martin. *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity*. Pergamon, 2003. (Cité page 32.)

C.B. Carter et S.M. Holmes. *Phil. Mag.*, 35 :1161, 1977. (Cité page 57.)

S. Chantasiriwan et F. Milstein. *Phys. Rev. B*, 58 :5996, 1998. (Cité page 178.)

P. Chauve, T. Giamarchi, et P. Le Doussal. *Phys. Rev. B*, 62 :6241, 2000. (Cité pages 155 et 156.)

Q. Chen, X.-Y. Liu, et S.B. Biner. *Acta Mater.*, 56 :2937, 2008. (Cité pages 16 et 37.)

L. Cizek, P. Kratochvil, et B. Smola. *J. Mater. Sci.*, 9 :1517, 1974. (Cité page 27.)

Clouet. *Acta Mat.*, 54 :3543, 2006. (Cité page 77.)

E. Clouet, S. Garruchet, H. Nguyen, M. Perez, et C. S. Becquar. *Acta Mat.*, 56 :3450, 2008. (Cité pages 77 et 88.)

E. Clouet, L. Ventelon, et F. Willaime. *Phys. Rev. Lett.*, 102 :055502, 2009. (Cité page 80.)

D. J. H. Cockayne, I. L. F. Ray, et M. J. Whelan. *Phil. Mag.*, 20 :1265, 1969. (Cité page 160.)

A. H. Cottrell. *Strength of solids*. The Physical Society, London, 1947. 30. (Cité pages 29, 33 et 73.)

A. H. Cottrell et B. A. Bilby. *Proc. Phys. Soc.*, A62 :49, 1949. (Cité page 92.)

Z. Csahok, K. Honda, et T. Vicsek. *J. Phys. A*, 26 :171, 1993. (Cité page 162.)

W. A. Curtin, D. L. Olmsted, et L. G. Hector. *Nature Mater.*, 5 :875, 2006. (Cité page 41.)

M.S. Daw et M.I. Baskes. *Phys. Rev. B*, 29 :6440, 1984. (Cité pages 45 et 177.)

M.S. Daw, S.M. Foiles, et M.I. Baskes. *Mater Sci. Reports*, 9 :251, 1993. (Cité pages 16 et 45.)

G. De Wit et J. S. Koelher. *Phys. Rev.*, 116 :1113, 1959. (Cité page 69.)

C. S. Deo, D. J. Srolovitz, Wei Cai, et V. V. Bulatov. *Phys. Rev. B*, 71 :014106, 2005. (Cité page 37.)

B. Devincre et L. P. Kubin. *Mater. Sci. Eng. A*, 8 :234, 1997. (Cité page 37.)

D. A. Didenko et V. V. Pustovalov. *Journal of Low Temperature Physics*, 2 :65, 1973. (Cité page 64.)

N. Doukhan et G. Saada. *Le Journal de Physique*, 33 :915, 1972. (Cité pages 35 et 80.)

M. Doyama, Y. Kogure, et T. Nozaki. *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B*, 255 :85, 2007. (Cité page 39.)

M. Draissia et M.-Y. Debili. *Central European Journal of Physics*, 3 :395, 2005. (Cité page 27.)

M. S. Duesbery. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 6 :35, 1998. (Cité pages 61 et 63.)

F. Ercolessi et J.B. Adams. *Europhys. Lett.*, 26 :583, 1994. (Cité pages 45 et 178.)

J. D. Eshelby. *Proc. Roy. Soc. Lond. A*, 241 :376, 1957. (Cité pages 34 et 74.)

Y. Estrin et L.P. Kubin. *Mater. Sci. Eng. A*, 137 :125, 1991. (Cité page 24.)

F. Family et T. Vicsek. *Dynamic of Fractal Surfaces*. World Scientific, Singapore, 1991. (Cité page 162.)

K. Farrell, T. S. Byun, et N. Hashimoto. *Journal of Nuclear Materials*, 335(3) : 471, 2004. (Cité page 14.)

P. Feltham. *J. Appl. D*, 1 :303, 1968. (Cité page 27.)

J. C. Fisher. *Acta Metall.*, 2 :9, 1954. (Cité pages 28, 29 et 88.)

R. L. Fleischer. *Acta Metall.*, 9 :996, 1961. (Cité page 34.)

R. L. Fleischer. *Acta Metall.*, 11 :203, 1963. (Cité pages 9, 34 et 35.)

R. L. Fleischer et W. R. Hibbard. The relation between structure and mechanical properties of metals. *Proc. Conf. at N.P.L.*, 1 :262, 1963. (Cité pages 29, 30, 87 et 129.)

R.L. Fleischer. *The Strengthening of Metals*. Reinold Press Edition, 1964. 93. (Cité page 28.)

P. A. Flinn. *Acta Metall.*, 6 :631, 1958. (Cité page 28.)

A. Foreman et M. Makin. *Phil. Mag.*, 14 :911, 1966. (Cité pages 30, 36 et 139.)

A. J. E. Foreman. *Acta Metall.*, 3 :322, 1955. (Cité pages 47 et 69.)

D. François, A. Pineau, et A. Zaoui. *Comportement mécanique des matériaux (Elasticité et plasticité)*. Hermes, 1995. (Cité pages 13, 14, 48 et 108.)

J. Friedel. *Les Dislocations*. Gauthier-Villars, Paris, 1956. 205. (Cité page 25.)

J. Friedel. The relation between structure and mechanical properties of metals. *Proc. Conf. at N.P.L.*, 15 :410, 1963. (Cité page 32.)

J. Friedel. *Dislocations*. Addison-Wesley, New York, 1964. (Cité pages 10, 25, 30, 32, 69, 105 et 116.)

H. J. Frost et M. F. Ashby. *Deformation mechanism maps : the plasticity and creep of ceramics*. Pergamon, Oxford, 1982. (Cité pages 108 et 172.)

C. L. Fua, C. T. Liua, X.-L. Wanga, M. Krcmara, et J. A. Fernandez-Baca. *Intermetallics*, 12 :911, 2004. (Cité page 42.)

L. Gao, R.S. Chen, et E.H. Han. *J. Alloys Comp.*, 472 :234, 2009. (Cité page 28.)

J. Garstone et R. W. K. Honeycombe. *Dislocations and Mechanical Properties of Crystals*. Wiley, New York, 1957. 391. (Cité page 27.)

C. Gault, A. Dauger, et P. Boch. *Phys. Stat. Sol.(a)*, 43 :625, 1977. (Cité page 179.)

J. J. Gilman. *Tans. AIME J. Metals*, 8 :1326, 1956. (Cité page 26.)

S. Glasstone, K.J. Laidler, et H. Erying. *The theory of rate processes*. McGraw-Hill, New-York, 1941. (Cité pages 103 et 106.)

J.F. Gouyet. *Defect and Diffusion Forum Vols*, 194-199, 2001. 1. (Cité page 119.)

A. V. Granato. *Phys. Rev. B*, 4 :2196, 1971. (Cité page 23.)

A. V. Granato, K Lücke, J. Schlipf, et L. J. Teutonico. *J. Appl. Phys.*, 35 : 2732, 1963. (Cité pages 112, 116 et 118.)

G. Gremaud. *Mater. Sci. and Eng. A*, 370 :191, 2004. (Cité page 25.)

G. Gremaud et S. Kustov. *Phys. Rev. B*, 13 :9353, 1999. (Cité page 24.)

J. Gubicza, N. Q. Chinh, Z. Horita, et T.G. Langdon. *Mater. Sci. and Eng. A*, 387 :55, 2004. (Cité page 16.)

L. A. Gypen et A. Deruyttere. *J. Mater. Sci.*, 12 :1028, 1977a. (Cité page 132.)

L. A. Gypen et A. Deruyttere. *J. Less-Common Met.*, 56 :91, 1977b. (Cité page 132.)

L. A. Gypen et A. Deruyttere. *Scipta Metall.*, 15 :815, 1981. (Cité page 34.)

Leshhorn H., Nattermann T., Stepanow S., et Tang L. H. *Ann. Phys.*, 6 :1, 1996. (Cité page 161.)

P. Haasen. *Phil. Mag.*, 28 :384, 1958. (Cité page 64.)

P. Haasen. *Dislocations in Solids*, volume 4. North-Holland, Amsterdam, 1979. (Cité pages 9, 21, 25 et 35.)

H. Hakkinen, S. Makinen, et M. Manninen. *Phys. Rev. B*, 41 :12441, 1990. (Cité page 54.)

E.O. Hall. *Proc. Phys. Soc. B*, 64 :747, 1951. (Cité page 14.)

K. Hardikar, V. Shenoy, et R. Phillips. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 49 :1951, 2001. (Cité page 82.)

P. Heino, L. Perondi, K. Kaski, et E. Ristolainen. *Phys. Rev. B*, 60 :14625, 1999. (Cité page 57.)

C. H. Henager et R. G. Hoagland. *Scripta Mater.*, 50 :1091, 2004. (Cité page 80.)

C. H. Henager et R. G. Hoagland. *Scripta Mater.*, 35 :4477, 2005. (Cité pages 60 et 80.)

A. A. Hendrickson et M. E. Fine. *Trans. AIME*, 221 :967, 1961. (Cité pages 26, 27 et 28.)

A. Hikata, J. Deputat, et C. Elbaum. *Phys. Rev. B*, 6(10) :4008, 1972. (Cité page 114.)

A. Hikata, R. A. Johnson, et C. Elbaum. *Phys. Rev. B*, 2(12) :4856, 1970a. (Cité page 114.)

A. Hikata, R. A. Johnson, et C. Elbaum. *Phys. Rev. Lett.*, 24(5) :215, 1970b. (Cité page 114.)

M. Hiratani et V.V. Bulatov. *Phil. Mag. Lett.*, 84 :461, 2004. (Cité pages 37 et 132.)

M. Hiratani, H.M. Zbib, et M.A. Khaleel. *International Journal of Plasticity*, 19 :1271, 2003. (Cité page 37.)

P. Hirel, J. Godet, S. Brochard, L. Pizzagalli, et P. Beauchamp. *Phys. Rev. B*, 78 :064109, 2008. (Cité page 100.)

J.P. Hirth, T. Jossang, et J. Lothe. *J. Appl. Phys.*, 37 :110, 1966. (Cité page 64.)

J.P. Hirth et J. Lothe. *Theory of dislocations*. Wiley Interscience, New York, 1982. (Cité pages 48, 55, 60, 69, 74, 79 et 80.)

P. Hänggi, P. Talkner, et M. Borkovec. *Rev. Mod. Phys.*, 62, 1990. 252. (Cité page 103.)

G. Horvath, Q. Nguyen Chinh, J. Gubicza, et J. Lendvai. *Mater. Sci. Eng. A*, 445 :186, 2007. (Cité page 16.)

R. D. Isaac et A. V. Granato. *Phys. Rev. B*, 37 :9278, 1988. (Cité page 155.)

P. Jax, P. Kratochvil, et P. Haasen. *Acta Metall.*, 18 :237, 1970. (Cité pages 14, 27 et 34.)

H. Jónsson, G. Mills, et K. Jacobsen. *Classical and Quantum Dynamics in Condensed Phase Simulations*. World Scientific, Singapore, 1998. (Cité page 108.)

B. Joos et M.S. Duesbery. *Phys. Rev. Lett.*, 78 :266, 1997. (Cité page 63.)

M. Jouiad, F. Pettinari, N. Clément, et A. Coujou. *Phil. Mag. A,*, 79 :2591, 1999. (Cité page 89.)

T. Kan et P. Haasen. *Z. Metallkd.*, 61 :255, 1970. (Cité page 27.)

M. Kardar. *Physics Reports*, 301 :85, 1998. (Cité page 158.)

M. Kardar, G. Parisi, et Y. C. Zhang. *Phys. Rev. Lett.*, 56 :889, 1986. (Cité page 162.)

A. Kelly et R.B. Nicholson. *Prog. Mater. Sci.*, 10 :151, 1963. (Cité page 14.)

H. O. K. Kirchner. *Dislocations 1984*. Editions du CNRS, Paris, 1984. 53. (Cité page 37.)

U. F. Kocks. *A Statistical Theory of Alloy Hardening, in Physics of Strength and Plasticity*. MIT Press, 1969. (Cité page 134.)

U.F Kocks, A. Argon, et M. Ashby. *in Thermodynamics and Kinetic of slip*. Pergamon Press, Oxford, 1975. 60. (Cité pages 36, 105, 106, 108 et 139.)

T. J. Koppenaal et M. E. Fine. *Trans. AIME*, 224 :347, 1962. (Cité pages 23, 26 et 27.)

H. A. Kramers. *Physica*, 4, 1940. 284. (Cité pages 116 et 118.)

L. P. Kubin, G. Canova, M. Condat, B. Devincre, V. Pontikis, et Y. Bréchet. *Solid State Phenomena*, 23 :455, 1992. (Cité page 37.)

L. P. Kubin, Ph. Spiesser, , et Y. Estrin. *Acta Metall.*, 30 :385, 1982. (Cité page 24.)

D. Kuhlmann-Wilsdorf. The theory of dislocation-based crystal plasticity. *Phil. Mag. A*, 79 :955, 1999. ISSN 0141-8610. (Cité page 14.)

A. Yu. Kuksin, V. V. Stegaoelov, et A. V. Yanilkin. *Doklady Physics*, 53 :287, 2008. (Cité page 114.)

C. T.and Arsenault R. J. Kuo. *Mater. Sci. Eng.*, 30 :65, 1977. (Cité page 79.)

R. Labusch. *Phys. Stat. Sol.*, 41 :659, 1970. (Cité pages 10, 30, 131 et 132.)

R. Labusch. *Acta Metall.*, 20 :917, 1972. (Cité pages 30 et 135.)

R. Labusch. *J. of Appl. Phys.*, 48 :2450, 1977. (Cité page 36.)

G. Lehmann. *J. Phys. D*, 2 :126, 1969. (Cité page 27.)

G. Leibfried. *Dislocations and Mechanical Properties of Crystals*. Wiley, New York, 1956. 495. (Cité page 117.)

C. Li, D.Y. Li, J.C. Li, , et Q. Jiang. Microstructure and mechanical properties of multicomponent aluminum alloy by rapid solidification. *J. of Mater. Eng. and Perform.*, 18 :79–82, 2009. ISSN 1059-9495. (Cité page 16.)

G. Liebfried. *Z. Phys.*, 127, 1950. 344. (Cité page 114.)

X.-Y. Liu, J. B. Adams, F. Ercolessi, et J. A. Moriarty. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 4 :293, 1996. (Cité pages 73 et 178.)

X.-Y. Liu, P. P. Ohotnicky, J. B. Adams, C. L. Rohrer, et R. W. Hyland. *Surf. Sci.*, 373 :357, 1997. (Cité page 178.)

X. Y. Liu, J. Wang, et S. B. Biner. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 16 : 045002, 2008. (Cité pages 77 et 88.)

Y. C. Liu et P. C. J. Gallagher. *J. Appl. Phys.*, 42(9) :3322, 1971. (Cité pages 76 et 138.)

K. J. Må løy, S. Santucci, J. Schmittbuhl, et R. Toussaint. *Phys. Rev. Lett.*, 96 :045501, 2006. (Cité pages 163 et 164.)

M. R. Marcelin. *Ann. Physique*, 3, 1915. 120. (Cité page 99.)

J. Marian et A. Caro. *Phys. Rev. B*, 74 :24113, 2006. (Cité pages 41, 115 et 155.)

N. I. Medvedeva, Yu. N. Gornostyrev, et A. J. Freeman. *Phys. Rev. B*, 76 : 212104, 2007. (Cité page 42.)

Y. Mishima, S. Ochiai, N. Hamao, M. Yodogawa, et T. Suzuki. *Tans. Jap. Met.*, 27 :656, 1986. (Cité pages 28, 35 et 128.)

Y. Mishima, S. Ochiai, et T. Suzuki. *Acta. Metall.*, 33 :1161, 1984. (Cité page 178.)

A. Molinari, Y. Estrin, et D. Dudzinski. *International Journal of Plasticity*, 9 (3) :317, 1993. (Cité page 24.)

G. Monnet. *Acta Mater.*, 55 :5081, 2007. (Cité page 81.)

D. Mordehai, Y. Ashkenazy, I. Kelson, et G. Makov. *Phys. Rev. B*, 67 :024112, 2003. (Cité page 114.)

P. Moretti, M.-C. Miguel, M. Zaiser, et S. Zapperi. *Phys. Rev. B*, 69 :214103, 2004. (Cité page 160.)

N. F. Mott. *Imperfections in Nearly Perfect Crystals*. John Wiley, New York, 1952. 173. (Cité page 30.)

N. F. Mott et F. R. N. Nabarro. *Report on the Strength of Solids*. Physical Society, London, 1948. 1-19. (Cité pages 30 et 31.)

M. Murayama et K. Hono. *Acta Mater.*, 47(5) :1537, 1999. (Cité page 14.)

F. R. N. Nabarro. *Proc. Phys. Soc.*, 59 :256, 1947. (Cité page 54.)

F. R. N. Nabarro. *Phil. Mag.*, 35 :613, 1977. (Cité page 30.)

F. R. N. Nabarro. *Dislocations and Properties of Real Materials*. The Institute of Metals, London, 1985. (Cité pages 10 et 30.)

F.R.N. Nabarro. *Theory of Crystal Dislocations*. Oxford University Press, Oxford, UK, 1967. (Cité pages 68, 81, 133 et 144.)

Y. Nakada et A. S. Keh. *Metall. Trans.*, 2 :441, 1971. (Cité page 28.)

H. Neuhauser. *Phys. Scripta*, 49 :412, 1993. (Cité pages 26 et 27.)

H. Neuhauser, Ch. Schwink, et H. Traub. *Acta Metall.*, 25 :1289, 1977. (Cité page 23.)

W.E. Nixon et J.W. Mitchell. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A*, 376 :343, 1981. (Cité page 28.)

T. Nogaret et D. Rodney. *Phys. Rev. B*, 74 :134110, 2006. (Cité pages 36 et 189.)

T. Nogaret, D. Rodney, M. Fivel, et C. Robertson. *J. of Nucl. Mater.*, 380 :22, 2008. (Cité page 14.)

T. V. Nordstrom et C. R. Barett. *J. Mater. Sci.*, 7 :1052, 1972. (Cité page 16.)

P. K. V. V. Nukala, S. Zapperi, M. J. Alava, et S. Simunovi. *Int. J. Fract.*, 154 :119, 2008. (Cité page 161.)

D. L. Olmsted, K. Y. Hardikar, et R. Phillips. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 9 :215, 2001. (Cité page 62.)

D. L. Olmsted, L. G. Hector, et W. A. Curtin. *Jour. of Mech. Phys. Sol.*, 54 : 1763, 2006. (Cité pages 10, 16 et 39.)

D.L. Olmsted, L.G. Hector, W.A. Curtin, et R.J. Clifton. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 13 :371, 2005. (Cité pages 41, 114, 115 et 155.)

K. Ono. *J. Appl. Phys.*, 39, 1968. 1803. (Cité page 108.)

Yu N Osetsky et D J Bacon. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 11 :427–446, 2003. (Cité page 99.)

M. Patriarca P. Szelestey et K. Kaski. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 11 :883, 2003. (Cité pages 55 et 63.)

T. A. Parkhomenko et V. V. Pustovalov. *Phys. Stat. Sol. (a)*, 74 :11, 1982. (Cité pages 23 et 24.)

S. Patinet. *Proc. MMM*, page 840, 2008. (Cité page 12.)

S. Patinet, D. Bonamy, et L. Proville. An atomic-scale study of dislocation dynamics intermittency in solid solution. 2009. (Cité page 12.)

S. Patinet et L. Proville. *Problème du durcissement par solution solide : Statistique du glissement d'une dislocation vis dans une population de défauts aléatoires*. 2007. (Cité page 12.)

S. Patinet et L. Proville. *Phys. Rev. B*, 78 :104109, 2008. (Cité page 12.)

S. Patinet et L. Proville. Atomistic simulation of the dislocation pinning by substitutional mg atoms in al. 2009a. (Cité page 12.)

S. Patinet et L. Proville. Solid solution hardening rate in faced centered binary alloys. 2009b. (Cité page 12.)

R. E. Peierls. *Proc. Phys. Soc.*, 52 :23, 1940. (Cité page 54.)

B. W. Person. *A Handbook Lattice Spacing and Structures of Metals and Alloys*. Pergamon, New York, 1958. (Cité page 178.)

N.J. Petch. *J. Iron Steel Inst.*, 174 :25, 1953. (Cité page 14.)

B. V. Petukhov. *Crystal. Rep.*, 52 :112, 2007. (Cité page 24.)

J. Philibert, A. Vignes, Y. Bréchet, et P. Combrade. *Métallurgie du minerai au matériau*. Dunod, 2002. (Cité page 13.)

W. L. Phillips. *Trans. AIME*, 230 :526, 1964. (Cité page 27.)

R.C. Picu, G. Vincze, J. J. Gracio, et F. Barlat. *Scripta Mater.*, 54 :71, 2006. (Cité page 16.)

R.C. Picu, G. Vincze, F. Ozturk, J. J. Gracio, F. Barlat, et A. M. Maniatty. *Mater. Sci. Eng. A*, 390 :334, 2005. (Cité page 25.)

R.C. Picu et D. Zhang. *Acta Mater.*, 52 :161, 2004. (Cité page 41.)

L. Pillon, C. Denoual, et Y.-P. Pellegrini. *Phys. Rev. B*, 76 :224105, 2007. (Cité page 112.)

V.P. Podkyuko et V.V. Pustovalov. *Cryogenics*, 18 :589, 1978. (Cité pages 21, 24, 27, 127 et 128.)

J. P. Poirier. *Plasticité à haute température des solides cristallins*. Eyrolles, Paris, 1976. 217. (Cité page 29.)

H. Pottebohm, G Neite, et E Nembach. *Mater. Sci. Eng.*, 60 :189, 1983. (Cité page 179.)

L. Proville. Depinning of a discrete elastic string from a two dimensional random array of weak pinning points. *arXiv :0904.3357v1 accepté pour publication dans Annals of Physics*, 2009. (Cité pages 36 et 189.)

L. Proville, D. Rodney, Y. Bréchet, et G. Martin. *Phil. Mag.*, 86 :3893, 2006. (Cité pages 10, 16, 31, 40, 78, 81, 89, 94, 123, 147, 151 et 173.)

P. Gumbsch R. Schrolla, V. Vitek. *Acta Mater.*, 3 :903, 1998. (Cité page 49.)

C. M. F. Rae et R. C. Reed. *Acta Mater.*, 55(3) :1067, 2007. (Cité page 16.)

R. H. Rautioaho. *Phys. Status Solidi b*, 112 :83, 1982. (Cité page 57.)

E. Rodary, D. Rodney, L. Proville, Y. Bréchet, et G. Martin. *Phys. Rev. B*, 70 :054111, 2004. (Cité pages 10, 16, 39, 40, 73, 147, 151, 155 et 178.)

D. Rodney. *Thèse de doctorat : Dislocations et Processus Élémentaires de la Plasticité dans les Métaux CFC*. 1999. (Cité page 85.)

D. Rodney. Habilitation à diriger des recherches : Apports des simulations à la physique de la déformation. 2006. (Cité page 46.)

D. Rodney. *Phys. Rev. B*, 76 :144108, 2007. (Cité pages 99 et 108.)

D. Rodney et G. Martin. *Phys. Rev. B*, 61 :8714, 2000. (Cité pages 39 et 45.)

D. Rodney et L. Proville. *Phys. Rev. B*, 79 :094108, 2009. (Cité pages 110 et 119.)

A. Rosso. Dépiégeage de variétés élastiques en milieu aléatoire. Master's thesis, École normale supérieure, 2002. (Cité page 156.)

Ø. Ryen, O. Nijs, E. S. Lander, B. Holmedal, H.-E. Ekstro M, et E. Nes. *Metall. Mater. Trans. A*, 37 :1999, 2006. (Cité pages 24 et 27.)

G. Saada, J. Douin, F. Pettinari-Sturmel, A. Coujou, et N. ClÃ©ment. *Phil. Mag.*, 84 :807, 2004. (Cité page 183.)

H. Saka. *Dislocations in Solids*. University of Tokyo Press, 1985. (Cité pages 20 et 160.)

M. Sakamoto. *Phil. Mag. A*, 63 :1241, 1991. (Cité page 112.)

U. Schlagowski, o. Kanert, J. Th. M. De Hosson, et G. Boom. *Acta metall.*, 36 :865, 1988. (Cité page 135.)

G. Schoech. *Acta Mater.*, 49 :1179, 2001a. (Cité page 59.)

G. Schoech. *Phil. Mag. A*, 81 :1161, 2001b. (Cité page 59.)

G. Schoeck. *Acta Mater.*, 54 :4865, 2006. (Cité page 60.)

G. Schoeck et M. Krystian. *Phil. Mag.*, 85 :949, 2005. (Cité pages 59 et 63.)

R. B. Schwarz, R. D. Isaac, et A. V. Granato. *Phys. Rev. Lett.*, 38 :554, 1977. (Cité page 24.)

A. Seeger et H. Bross. *Z. Physik*, 146 :242, 1956. (Cité pages 34 et 80.)

T. Shinoda, K. Masuda-Jindo, Y. Mishima, et T. Suzuki. *Phys. Rev. B*, 35 : 2156, 1987. (Cité page 35.)

D. J. Siegel. *Appl. Phys. Letters*, 87 :121901, 2005. (Cité page 138.)

M. A. Soare et W. A. Curtin. *Acta Mat.*, 56 :4046, 2008. (Cité pages 16 et 24.)

J. W. Steeds et J. R. Willis. *Dislocations in Solids*, volume 1. North-Holland, Amsterdam, 1979. 145. (Cité page 79.)

H. Suzuki. *Dislocations and Mechanical Properties of Crystals*. Wiley, New York, 1957. 361. (Cité pages 28, 29, 75 et 80.)

T. Suzuki, S. Takeuchi, et H. Yoshinaga. *Dislocation Dynamics and Plasticity*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1991. 32. (Cité pages 23, 28 et 32.)

P. Szelestey, M. Patriarca, et K. Kaski. *Mater. Sci. Eng. A*, 390 :393, 2005. (Cité page 63.)

D. Tabor. *The Hardness of Metals*. Oxford University Press, 1951. (Cité page 128.)

L.-H. Tang et Heiko Leschhorn. *Phys. Rev. A*, 45(12) :R8309, 1992. (Cité page 162.)

A. Tanguy, M. Gounelle, et S. Roux. *Phys. Rev. E*, 58 :1577, 1998. (Cité page 162.)

K. Tapasa, D. J. Bacon, et Yu. N. Osetsky. *Mater. Sci. and Eng. A*, 400 :109, 2005. (Cité page 39.)

K. Tapasa, D. J. Bacon, et Yu. N. Osetsky. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, 14 : 1153, 2006. (Cité pages 38, 39, 40, 41 et 155.)

K. Tapasa, Yu. N. Osetsky, et D. J. Bacon. *Acta Mater.*, 55 :93, 2007. (Cité pages 39, 41 et 99.)

J. Tchoufag, S. Patinet, et L. Proville. *Activation thermique du glissement des dislocations ancrées par des atomes de soluté dans les métaux cubiques à faces centrées*. 2009. (Cité pages 12 et 98.)

D. A. Terentyev, G. Bonny, et L. Malerba. *Acta Mater.*, 56 :3229, 2008. (Cité pages 39 et 132.)

L. J. Teutonico, A. V. Granato, et K. LÃ$\frac{1}{4}$cke. *J. Appl. Phys.*, 35 :220, 1961. (Cité page 118.)

H. Traub, H. Neuhauser, et Ch. Schwink. *Acta Metall.*, 25 :437, 1977. (Cité pages 26 et 27.)

D. R. Trinkle et C. Woodward. *Science*, 310 :1665, 2005. (Cité page 42.)

H. Tsuzuki, P. S. Branicio, et J. P. Rino. *Acta Mater.*, 57 :1843, 2009. (Cité page 115.)

L. F. Vassamillet et T. B. Massalski. *J. of Appl. Phys.*, 34(11) :3398–3402, 1963. (Cité pages 76 et 138.)

L. Vegard. *Z. Phys.*, 5 :17, 1921. (Cité page 178.)

L. Ventelon. *Core structure of screw dislocations in Fe from first-principles*. 2008. (Cité page 15.)

B. Vijay, B. Shenoy, et R. Phillips. *Phil. Mag. A*, 76 :367, 1997. (Cité page 68.)

G. H. Vineyard. *J. Phys. Chem. Solids*, 3 :121, 1957. (Cité pages 106, 116 et 118.)

V. Vitek. *Cryst. Lattice Defects*, 5 :1, 1974. (Cité pages 48, 49, 50, 51 et 52.)

V. Volterra. *Ann. Ec. Norm. Sup.*, 24 :401, 1907. (Cité page 59.)

A. F. Voter et S. P. Chen. *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, 82 :175, 1987. (Cité page 178.)

A. Walcker, D. Weygand, et O. Kraft. *Mater. Sci. Eng. A*, 400 :397, 2005. (Cité page 110.)

M. Wen, A.H.W. Ngan, S. Fukuyama, et K. Yokogawa. *Phil. Mag.*, 85 :1917, 2005. (Cité pages 53, 54, 55, 62 et 63.)

H. Wendt et R. Wagner. *Acta Metall.*, 30 :1561, 1982. (Cité pages 22 et 27.)

K. H. Westmacott et R. L. Peck. *Phil. Mag.*, 23 :611, 1971. (Cité page 57.)

Th. Wille, G. Gieseke, et Ch. Schwink. *Acta Metall.*, 35 :2679, 1987. (Cité pages 23, 25, 27 et 88.)

C. Woodward, D. R. Trinkle, L.G. Hector, et D. L. Olmsted. *Phys. Rev. Lett.*, 100 :045507, 2008. (Cité page 55.)

Z. Xu et R. C. Picu. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 14 :195, 2006. (Cité page 41.)

Z. Xu et R. C. Picu. *Phys. Rev. B*, 76 :094112, 2007. (Cité page 37.)

Y. Yao, T. Wang, et C. Wang. *Phys. Rev. B*, 59 :8232, 1999. (Cité page 183.)

S. Yip. *Handbook of Materials Modeling*. Springer, Netherland, 2005. (Cité page 15.)

M. Zaiser, F. Madani Grasset, V. Koutsos, et E. C. Aifantis. *Phys. Rev. Lett.*, 93 :195507, 2004. (Cité page 160.)

J. Zander, R. Sandstrom, et L. Vitos. *Comput. Mater. Sci.*, 41 :86, 2007. (Cité pages 27 et 42.)

S. Zapperi et M. Zaiser. *Mater. Sci. Eng. A*, 309 :348, 2001. (Cité page 160.)

D. Zhang et R.C. Picu. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 12 :121, 2004. (Cité page 41.)

C. W. Zhao, Y. M. Xing, C. E. Zhou, et P. C. Bai. *Acta Mater.*, 56 :2570, 2008. (Cité page 54.)

J.-C. Zhao. *Adv. Eng. Mater.*, 3 :143, 2001. (Cité pages 27 et 128.)

S.J. Zhou, D. L. Preston, P. S. Lomdahl, et D. M. Beazley. *Science*, 279 :1525, 1998. (Cité page 38.)

J. A. Zimmerman, H. Gao, et F. F. Abraham. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 8 :103, 2000. (Cité page 56.)

Notations

KPZ	Classe d'universalité dite Kardar-Parisi-Zhang
CCR	Contrainte Critique Résolue
CFC	Cubiques à Faces Centrées
CC	Cubiques Centrés
DSS	Durcissement par Solution Solide
DDD	Dynamique des Dislocations Discrètes
DM	Dynamique Moléculaire
HCP	Hexagonaux Compacts
EAM	Méthode de l'Atome Immergé
BF	Modèle de Butt-Feltham
FF	Modèle de Fleischer-Friedel
FMS	Modèle de Friedel-Mott-Suzuki
MNL	Modèle de Mott-Nabarro-Labusch
P-N	Peierls et Nabarro
PD	Percolation Dirigée
TL	Tension de Ligne
DFT	Théorie de la Fonctionnelle de la Densité
TET	Théorie de l'État de Transition

$\Delta\tau_{hors}$	Contraintes d'écoulement d'une solution solide modèle contenant des solutés uniquement en dehors des plans contigus au plan de glissement
$\Delta\tau_{dans}$	Contraintes d'écoulement d'une solution solide modèle ne contenant des solutés que dans les plans contigus au plan de glissement
u	Champ de déplacement
α	Coefficient d'accrochage caractéristique
B	Coefficient d'amortissement de la dislocation
ν	Coefficient de Poisson/Exposant critique de corrélation
K	Coefficient élastique décrivant l'interaction entre les dislocations partielles
c_s	Concentration atomique en atomes de soluté
k	Constante de Boltzmann
k_γ	Constante de raideur du couplage entre les dislocations

	partielles
τ_{app}	Contrainte appliquée
τ_p	Contrainte de Peierls
τ_p^{eff}	Contrainte de Peierls effective
τ_0	Contrainte d'écoulement extrapolée à température nulle
τ_c	Contrainte d'écoulement ou contrainte critique
τ_{esc}	Contrainte d'Escaig
τ_μ	Contrainte du plateau athermique
ε_r	Déformation à la rupture
η	Demi-étalement des cœurs de dislocation partielle
ρ	Densité de dislocations
$D(x)$	Déplacement relatif des plans cristallins contigus au plan de glissement dans la direction du vecteur de Burgers en fonction de la position dans la direction de glissement x
d	Distance de dissociation entre les dislocations partielles
R	Distance par rapport au centre de la dislocation
E_{coh}	Énergie de cohésion
γ_0	Énergie de faute d'empilement
E_μ	Énergie d'interaction dislocation-soluté due à l'effet de module
E_a	Énergie d'interaction dislocation-soluté due à l'effet de taille
$E_{el}(u(x))$	Énergie élastique
ΔH	Enthalpie d'activation
ΔS	Entropie d'activation
$E(t_a)$	Espérance du temps d'attente
Γ_0	Estimation classique de la tension de ligne
Γ_{el}	Estimation de la tension de ligne par la théorie élastique
W	Étalement moyen de la dislocation dans le plan de glissement
ζ	Exposant critique de rugosité
β	Exposant critique de croissance/Facteur de Labusch
θ	Exposant critique de vitesse
z	Exposant critique dynamique
r	Exposant de la concentration : statistique du DSS
H	Flexion maximale prise par la dislocation à l'équilibre ancrée entre deux obstacles
$G(\Delta x, \Delta t)$	Fonction de corrélation à deux points le long de la ligne de la dislocation
f_m	Force maximale d'obstacle
F_{im}	Force produite par les dislocations partielles images
ν_{eff}	Fréquence d'attaque effective

ν_D	Fréquence de Debye
λ	Frottement visqueux de la dynamique de Langevin/ Paramètre d'une loi de probabilité exponentielle
σ_y	Limite d'élasticité
l_{av}	Longueur de corrélation de la ligne en propagation
m^*	Masse effective de la dislocation
$E_{msf}(u(x))$	Misfit energy
μ	Module de cisaillement
$b_\perp$	Module effectif du vecteur de Burgers d'une dislocation partielle dans la direction perpendiculaire au vecteur de Burgers de la dislocation parfaite
S_{ijkl}	Modules de complaisance
ϵ_μ	Paramètre de désaccord de module
ϵ_a	Paramètre de désaccord de taille
a	Paramètre de maille
b_c et b_v	Parties coin et vis du vecteur de Burgers des dislocations partielles
$U(x)$	Paysage d'énergie interne
t_0	Période d'attaque
a'	Période du réseau dans la direction de glissement
w	Portée d'interaction dislocation-obstacle
$\overline{W}$	Portée moyenne d'interaction dislocation-obstacle
x_s	Position de col de la dislocation
x	Position de la dislocation dans la direction de glissement
x_0	Position stable de la dislocation
$V(x,y)$	Potentiel d'interaction dislocation-obstacle
p	Pression hydrostatique
R_p	Résistance à la traction
$W(x,y)$	Somme des potentiels d'interaction dislocation-obstacles
s	Surface atomique des plans de glissement (111)
L_y	Taille du système dans la direction de la ligne de la dislocation
L_x	Taille du système dans la direction de glissement
L_z	Taille du système dans la direction perpendiculaire au plan de glissement
T	Température
T_p	Température du plateau
T_0	Température limite de l'anomalie des basses températures
T_d	Température limite du régime des hautes températures
t	Temps
t_a	Temps d'attente de franchissement d'un atome de soluté
$\bar{t}_a$	Temps d'attente moyen de franchissement d'un atome de soluté
Γ	Tension de ligne de la dislocation

Γ_p	Tension de ligne d'une dislocation partielle
σ_{ij}	Terme ij de la matrice des contraintes
b	Vecteur de Burgers des dislocations parfaites
b_p	Vecteur de Burgers des dislocations partielles
$\dot{\epsilon}$	Vitesse de déformation
C_l	Vitesse du son longitudinale
C_t	Vitesse du son transversale
v	Vitesse moyenne de la dislocation
v_a	Volume de formation du soluté
v	Volume d'un atome de la matrice

Ce document a été préparé à l'aide de l'éditeur de texte GNU Emacs et du logiciel de composition typographique LaTeX 2ε utilisant la classe pour mémoire de thèse développée par Julien Chiquet.

Titre Durcissement par solution solide dans les alliages métalliques cubiques à faces centrées

Résumé Cette étude consiste à mettre en œuvre des simulations atomistiques de glissement des dislocations coin et vis dans deux alliages modèles de Ni(Al) et Al(Mg), décrits par la Méthode de l'Atome Immergé. Notre démarche s'appuie sur l'étude de l'interaction élémentaire entre dislocations et solutés pour aboutir à l'étude du durcissement par solution solide des métaux cubiques à faces centrées. Nous identifions les origines physiques de l'intensité et de la portée d'interaction entre une dislocation et un atome de soluté. Nous modélisons le franchissement thermiquement activé d'un atome de soluté par une dislocation. Nous montrons que le durcissement des segments de dislocation coin et vis est analogue. Nous développons un modèle de tension de ligne capable de reproduire quantitativement les calculs atomistiques de la contrainte d'écoulement. Enfin, nous identifions la classe d'universalité à laquelle appartient une dislocation en solution solide lors de la transition de dépiégeage.

Mots-clés dislocation, durcissement, solution solide, physique statistique, simulation atomistique

Title Solid solution hardening in face centered binary alloys : Gliding statistics of a dislocation in random solid solution by atomistic simulation

Abstract The glide of edge and screw dislocation in solid solution is modeled through atomistic simulations in two model alloys of Ni(Al) and Al(Mg) described within the embedded atom method. Our approach is based on the study of the elementary interaction between dislocations and solutes to derive solid solution hardening of face centered cubic binary alloys. We identify the physical origins of the intensity and range of the interaction between a dislocation and a solute atom. The thermally activated crossing of a solute atom by a dislocation is studied at the atomistic scale. We show that hardening of edge and screw segments are similar. We develop a line tension model that reproduces quantitatively the atomistic calculations of the flow stress. We identify the universality class to which the dislocation depinning transition in solid solution belongs.

Keywords dislocation, hardenning, solid solution, statistical physics, atomistic simulation