



Contribution à la modélisation champ de phase des dislocations.

Pierre-Antoine Geslin

► To cite this version:

Pierre-Antoine Geslin. Contribution à la modélisation champ de phase des dislocations.. Matériaux. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2013. Français. NNT: . tel-01009892

HAL Id: tel-01009892

<https://theses.hal.science/tel-01009892>

Submitted on 18 Jun 2014

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ PARIS VI - PIERRE ET MARIE CURIE

THÈSE DE DOCTORAT

présentée pour obtenir le grade de Docteur de l'Université Paris VI,
spécialité « Physique et Chimie des Matériaux »

par

Pierre-Antoine GESLIN

CONTRIBUTION À LA MODÉLISATION CHAMP DE PHASE DES DISLOCATIONS

Thèse soutenue le 16 décembre 2013 devant le jury composé de :

M. STÉPHANE ROUX	LMT Cachan	(Président)
M. DAVID RODNEY	Université Claude Bernard Lyon 1	(Rapporteur)
M. ALAIN KARMA	Northeastern University	(Rapporteur)
M. EMMANUEL CLOUET	SRMP, CEA Saclay	(Examineur)
M. LUDOVIC THUINET	Université Lille 1	(Examineur)
M. ALPHONSE FINEL	LEM, Onera/CNRS	(Directeur de thèse)
M. BENOÎT APPOLAIRE	LEM, Onera/CNRS	(Encadrant de thèse)

Thèse préparée au sein du Laboratoire d'Étude des Microstructures - Onera/CNRS,
29 avenue de la division Leclerc, 92322 Châtillon

Remerciements

D'un point de vue scientifique mais aussi humain, cette thèse a été une expérience très enrichissante et je tiens à remercier ceux qui ont participé, de près ou de loin à ce travail accompli durant ces trois années passées au LEM.

Je tiens tout d'abord à adresser mes remerciements à David Rodney et Alain Karma qui ont accepté d'être rapporteurs de ce travail, à Stéphane Roux qui a bien voulu présider le jury et à Ludovic Thuinet et Emmanuel Clouet d'avoir accepté d'y participer. Je les remercie de l'attention particulière qu'ils ont apporté à mon manuscrit et pour leurs remarques judicieuses tant sur le travail effectué que sur les perspectives envisageables. J'ai beaucoup d'estime à leur égard et j'espère avoir la chance d'interagir à nouveau avec eux au cours des années à venir.

Ces travaux de thèse n'auraient pas été possibles sans l'encadrement attentif et diligent d'Alphonse Finel et de Benoît Appolaire. Je leur dois davantage que ce que les quelques lignes qui suivent peuvent transmettre. Je remercie tout d'abord Alphonse qui m'a proposé ce sujet de thèse et m'a accueilli au sein de son laboratoire. Je lui suis très reconnaissant d'avoir pris le temps de me transmettre une partie de ses vastes connaissances scientifiques mais aussi de m'avoir inculqué une méthode de travail aussi ambitieuse que rigoureuse. Son assurance et sa vision scientifique ont également permis de m'aiguiller avec justesse aux moments charnières de cette thèse. De plus, son enthousiasme et sa passion pour la science ont constitué un véritable générateur haute tension de motivation. Je remercie vivement mon encadrant élégant, Benoît, pour son soutien tant scientifique que moral tout au long de cette thèse. Sa connaissance encyclopédique de la littérature et son pragmatisme scientifique ont permis de m'éviter de nombreux écueils. J'ai également eut la chance de profiter de ses excellentes compétences de programmeur-herpétologue et de son perfectionnisme qui ne se satisfait pas de résultats intermédiaires. En plus de leur grande disponibilité et de leur encadrement assidu, leur humour et leur spontanéité ont rendu très agréables ces années de travail en commun. Je garderai un excellent souvenir de ces réunions prévues le matin, commencées l'après-midi et achevées parfois tard le soir devant un tableau rempli d'équations.

Je tiens également à remercier Yann Le Bouar, très sympathique shérif adjoint, pour son implication dans mes travaux de thèse et dont la porte était toujours ouverte même lorsque cela était rendu difficile par son emploi du temps. Il me faut également remercier Benoit Devincre et Ladislav Kubin, grands maîtres es dislocations, pour leur disponibilité ainsi que leurs précieux conseils.

Travailler au sein du LEM a été une expérience très plaisante, grâce aussi à la grande sympathie des membres du laboratoire. Je tiens à remercier Micheline, toujours prête à plaisanter autour d'un café et d'une efficacité redoutable les veilles de vacances ; Armelle et ses anecdotes de maître de conférence ; Jean-Seb et sa barbe pour leur aide efficace à toute sorte de problèmes informatiques ; Marie-Line et Bernard pour leur connaissance profonde de l'Onera ; Riccardo, aussi agile devant une assiette de spaghettis que sur un court de tennis ; Mathieu, maillot jaune du laboratoire, dont les blagues égailent toujours la pause café ; Hakim et ses baggy qui donnent un coup de jeune au laboratoire ; Georges et Denis dont les anecdotes incroyables inspirent à vivre une vie aussi remplie que la leur. Ces trois ans ont également été l'occasion de se lier d'amitié avec bon nombre de thésards/postdocs/stagiaires : en particulier, je remercie Maeva, co-bureau souriante et élégante, pour ses bavardages salutaires et ses récits de globetrotteuse assidue ; Sondes, munie de sa bonne humeur et de son ami poilu à 4 pattes (non, je ne parle pas de Jean-Pierre) ; Gaël et Pierre, toujours partants pour bavarder autour d'une pinte ou d'un verre de rhum ; Un grand merci à la nouvelle garde, Antoine et ses balles de ping-pong cristallisées, Pierre-Louis et sa piscine, Luc et son café (et son canapé),

Amandine et sa chimie, Léonard et ses origines brivistes, Ahmed et son violon, Laurent et son blouson en cuir pour leur dynamisme et leur bonne humeur communicatifs. Enfin, un grand merci à Aurélie et son retard de thèse, qui m'a permis de ne pas affronter seul l'épreuve de la rédaction, et pour avoir bourlinguer à mes côtés sur les routes plus ou moins carrossables du Vietnam. Un grand merci à tous les membres du laboratoire sus-cités et omis qui ont contribué à faire de cette thèse une expérience aussi agréable qu'enrichissante.

D'autre part, je tiens également à remercier tous ceux que j'ai côtoyé durant ces trois ans et qui ont participé d'une manière moins directe mais non moins efficace à la réussite de cette thèse. Je remercie tout d'abord Élodie qui a su me supporter (dans les deux sens du terme) durant mes premières années parisiennes. Je tiens également à remercier Étienne pour nos parties de tennis dominicales, auxquelles j'ai toujours participé avec plaisir quel que soit la météo et l'issue de la rencontre. Je remercie aussi chaleureusement Nina ainsi que tous les membres du TTM Châtillon pour les entraînements de tennis de table, toujours très efficaces pour me changer les idées. Merci aussi à mes camarades mineurs dont les situations géographiques enviables m'ont permis de passer quelques week-ends loin des équations.

Je remercie enfin (last but not least) mes parents pour leur soutien sans faille dont ils ont fait preuve pendant ces trois années, et pour avoir, d'une main de maître, organisé mon pot de thèse. Un grand merci aussi à ma bien chère sœur et toute sa petite famille pour leur soutien et le délicieux Saint-Nectaire dont j'espère continuer à me délecter lors de mon séjour outre-atlantique (un message subliminal s'est glissé dans cette phrase).

Résumé

Le comportement plastique des alliages métalliques est très souvent influencé par les interactions entre les précipités d'une seconde phase et les dislocations, dont la dynamique peut être étudiée par des méthodes de type champ de phase. En effet, ces méthodes présentent comme principal avantage leur caractère variationnel qui rend naturel le couplage avec la dynamique d'autres défauts (solutés, lacunes, précipités de seconde phase...). Ces travaux de thèse s'inscrivent dans ce contexte en proposant de nouveaux modèles champ de phase permettant d'étudier le comportement des dislocations, leurs interactions avec des précipités de seconde phase ainsi que les mécanismes de montée par absorption/émission de lacunes. Nous proposons tout d'abord un modèle d'élasticité non-linéaire, tenant compte du glissement des dislocations ainsi que de leur nucléation et du glissement dévié. L'utilisation de ce modèle permet de confirmer les mécanismes de perte de cohérence des précipités par la nucléation de boucles prismatiques envisagés dans des études antérieures. Nous proposons ensuite un couplage de cette approche avec un modèle tenant compte de l'évolution microstructurale de précipités Al_3Sc dans une matrice d'aluminium. Nous montrons notamment que les dislocations peuvent modifier significativement la morphologie de l'interface des précipités, ce qui peut affecter la réponse mécanique du matériau. Enfin, nous développons un modèle champ de phase pour la montée des dislocations tenant compte de la diffusion des lacunes. Nous nous attachons en particulier à étudier le caractère limitant du mécanisme d'absorption/émission de lacunes au niveau du cœur des dislocations.

Mots clés : dislocation, élasticité, plasticité, champ de phase, perte de cohérence, montée

Abstract

The plastic behavior of metallic alloys is often influenced by the interactions between second phase precipitates and dislocations. The dynamics of these linear defects can be investigated by phase-field methods whose main advantage is their variational nature, which enables a natural coupling with the dynamics of other defects (solute atoms, vacancies, second phase precipitates...). The purpose of this thesis is to develop phase field models able to study dislocations behavior, their interactions with second phase precipitates and climb mechanisms by vacancy absorption/emission. We first propose an elastically non-linear phase-field model that naturally accounts for dislocations glide, nucleation and cross-slip. Using this model, we confirm that coherency loss of precipitates can occur by prismatic punching mechanisms, as proposed in previous studies. Then, we propose a coupling between this approach and a phase field model for microstructural evolutions and apply it to the analysis of Al_3Sc precipitates in an aluminum matrix. We show that dislocations can modify significantly the precipitate interface morphology, which in turn can influence the mechanical response of the alloy. Finally, we propose a phase-field model for dislocation climb by vacancy diffusion and absorption/emission. We specially investigate the limiting character of the absorption/emission mechanisms at the dislocation core.

Keywords : dislocation, elasticity, plasticity, phase-field, coherency loss, climb

TABLE DES MATIÈRES

TABLE DES MATIÈRES	vi
INTRODUCTION	1
1 MODÈLE D'ÉLASTICITÉ NON-LINÉAIRE POUR LA DYNAMIQUE DES DISLOCATIONS	5
1.1 MODÉLISATION CONTINUE DES DISLOCATIONS	5
1.1.1 Le modèle de Frenkel-Kontorova (MFK)	5
1.1.2 Le modèle de Peierls-Nabarro (MPN)	7
1.1.3 Modèles de champ de phase pour les dislocations	11
1.1.4 Modèles d'élasticité périodique pour des dislocations	14
1.2 ECRITURE D'UN MODÈLE D'ÉLASTICITÉ PÉRIODIQUE	16
1.2.1 Introduction du modèle d'élasticité périodique dans un cas simple	16
1.2.2 Généralisation au cas 3D non isotrope	17
1.2.3 Implémentation numérique	21
1.3 VALIDATION DU MODÈLE	23
1.3.1 Structure de cœur	23
1.3.2 Champs de contrainte à longue distance	24
1.3.3 Contrainte de Peierls	25
1.4 CONCLUSION	29
2 PERTE DE COHÉRENCE PAR NUCLÉATION DE DISLOCATIONS	31
2.1 INTRODUCTION	31
2.1.1 Observations expérimentales	31
2.1.2 Etudes théoriques	33
2.2 FORMATION DE BOUCLES PRISMATIQUE - PROCESSUS D'ASHBY ET JOHNSON	35
2.3 PROCESSUS PLUS COMPLEXES	37
2.4 GÉNÉRATION DE TRAINS DE BOUCLES PRISMATIQUES	40
2.5 CONCLUSION	42
3 INTERACTIONS DISLOCATIONS/MICROSTRUCTURE EN ÉVOLUTION DANS L'ALLIAGE AL-SC	43
3.1 ÉTUDES THÉORIQUES DE L'INFLUENCE DES DISLOCATIONS SUR L'ÉVOLUTION MICROSTRUCTURALE	44
3.2 DESCRIPTION DES ALLIAGES ALUMINIUM-SCANDIUM	45
3.2.1 Description de la phase Al_3Sc	45
3.2.2 Influence des précipités Al_3Sc sur les propriétés mécaniques	47
3.3 DÉVELOPPEMENT D'UN MODÈLE DE CHAMP DE PHASE POUR L'ALLIAGE AL-SC	48
3.3.1 Energie libre du système	48
3.3.2 Paramétrage des fonctions f_{ch} et f_{grad}	49
3.3.3 Paramétrage de l'énergie élastique	50

3.3.4	Equations dynamiques	52
3.3.5	Adimensionnement et résolution numérique du modèle	55
3.4	INFLUENCE DES DISLOCATIONS SUR LA MORPHOLOGIE D'UNE INTERFACE PLANE	55
3.4.1	Observations expérimentales	55
3.4.2	Approche analytique	57
3.4.3	Comparaison avec les observations expérimentales de l'alliage CMSX-4	60
3.4.4	Simulations champ de phase	60
3.5	INTERACTION ENTRE UNE BOUCLE D'OROWAN ET UN PRÉCIPITÉ SPHÉRIQUE	63
3.6	INFLUENCE D'UNE DISLOCATION SUR LA MOBILITÉ D'UNE INTERFACE	63
3.7	PERSPECTIVE D'APPLICATION : HYDRURES DANS LE ZIRCONIUM	67
3.8	CONCLUSION	68
4	MODÈLE CHAMP DE PHASE POUR LA MONTÉE DES DISLOCATIONS	71
4.1	LES DIFFÉRENTES APPROCHES DE LA MONTÉE DES DISLOCATIONS	71
4.1.1	Calcul de la vitesse de montée dans un cas simple	72
4.1.2	Calcul de la vitesse de montée dans le cas d'une concentration faible en crans	74
4.1.3	Mesures expérimentales de la vitesse de montée	75
4.1.4	Les techniques de simulation pour l'étude de la montée	77
4.2	MODÈLE CHAMP DE PHASE POUR LA MONTÉE DES DISLOCATIONS	78
4.2.1	Présentation du modèle	78
4.2.2	Analyse du modèle	82
4.3	MONTÉE DE DISLOCATIONS ISOLÉES ET INFLUENCE DU PARAMÈTRE L	85
4.3.1	Montée sous l'effet d'une contrainte appliquée	86
4.3.2	Montée pilotée par une sursaturation	87
4.4	INFLUENCE DES INTERACTIONS ÉLASTIQUES ENTRE LACUNES ET DISLOCATIONS	89
4.4.1	Concentration à l'équilibre	90
4.4.2	Influence sur la vitesse de montée - approche analytique	91
4.4.3	Simulations champ de phase et résultats contradictoires	92
4.4.4	Influence de l'élasticité des lacunes sur la dislocation	94
4.4.5	Interactions élastiques lacunes-lacunes	95
4.4.6	Effet de traînée de Cottrell	97
4.5	MONTÉE DE DISLOCATIONS NON ISOLÉES	98
4.5.1	Influence de la distribution des dislocations	98
4.5.2	Vers le fluage	99
4.5.3	Annihilation d'un dipôle et influence de l'élasticité	101
4.6	CONCLUSION	103
	CONCLUSION GÉNÉRALE	105
A	ANNEXES	107
A.1	PISTE POUR LA CONSTRUCTION D'UNE ÉNERGIE PÉRIODIQUE POUR DES SYSTÈMES DE GLISSEMENT QUELCONQUES	109
A.2	COMPARAISON ENTRE LES GRILLES DIFFÉRENCES FINIES DÉCALÉES ET STANDARDS	109
A.3	CALCUL PARALLÈLE : COMPARAISON ENTRE MPI ET FFTW	111
A.3.1	Méthode 1 : Intégration semi-implicite et parallélisation en mémoire partagée	111
A.3.2	Méthode 2 : parallélisation en mémoire distribuée	112
A.3.3	Comparaison entre les deux stratégies	113
A.4	IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE DU MODÈLE DE MONTÉE	114

A.4.1	Intégration des équations dynamiques dans l'espace de Fourier	114
A.4.2	Résolution de l'équilibre élastique	116
A.4.3	Comparaison avec les différences finies classiques	117
A.5	CALCUL ANALYTIQUE DE LA VITESSE DE MONTÉE EN PRÉSENCE D'INTERAC- TIONS ÉLASTIQUES ENTRE LA DISLOCATION ET LES LACUNES	118
A.6	MODÉLISATION DE CRANS EN CHAMP DE PHASE	119
A.7	PISTE POUR COUPLER LE GLISSEMENT ET LA MONTÉE DES DISLOCATIONS EN CHAMP DE PHASE	122
BIBLIOGRAPHIE		125

INTRODUCTION

Contexte

Ces travaux de thèse ont été menés au sein du Laboratoire d'Étude des Microstructures (LEM), unité mixte Onera/CNRS. Ils s'inscrivent dans l'une de ses thématiques de recherche : l'étude des microstructures des alliages métalliques et leur influence sur les propriétés mécaniques.

Un moyen d'améliorer les propriétés mécaniques d'un alliage métallique est de faire précipiter une seconde phase sous la forme de précipités dispersés. En effet, ces précipités servent d'obstacles au mouvement des dislocations, vecteur de la déformation plastique. L'amélioration des propriétés mécaniques de ces matériaux passe donc par une compréhension fine des interactions entre dislocations et précipités. Ces interactions étant complexes et multiples, nous avons choisi d'en illustrer quelques unes dans deux types d'alliages couramment utilisés dans l'industrie aéronautique.

Les alliages d'aluminium sont utilisés comme matériaux de structure des avions du fait de leur faible masse volumique. Afin d'améliorer les propriétés mécaniques de l'aluminium, on y ajoute des éléments d'addition tels que le cuivre, le magnésium et le scandium. La présence d'éléments d'addition conduit à l'apparition de précipités dispersés dans la matrice dont la taille peut être contrôlée par des traitements thermiques. Ces précipités agissent comme des obstacles au glissement des dislocations, et sont responsables d'une amélioration des propriétés mécaniques de l'alliage, en particulier sa limite d'élasticité. Ces précipités possèdent une composition et une structure cristalline différentes de la matrice, conduisant à l'existence d'un désaccord paramétrique entre les deux phases. L'énergie élastique générée par ce désaccord paramétrique peut être relaxée par l'apparition de dislocations à l'interface précipité/matrice. L'apparition de telles dislocations est qualifiée de "perte de cohérence", du fait de l'introduction d'une discontinuité entre les réseaux cristallins. Dans le cas des alliages Al-Sc, la perte de cohérence des précipités Al_3Sc conduit à une chute des propriétés mécaniques de l'alliage et modifie la cinétique de mûrissement des précipités.

Les superalliages nickel-aluminium constituent un autre exemple de matériaux microstructurés. Ces alliages sont constitués d'une matrice notée γ et d'une forte fraction volumique de précipités Ni_3Al notés γ' . Ces alliages présentent d'excellentes propriétés mécaniques à haute température (fluage), c'est pourquoi ils sont utilisés dans les turbines de turbo-réacteur. À haute température, les interactions entre microstructures en évolution et plasticité de la matrice sont en partie responsables de la transition morphologique des précipités qui coalescent suivant une direction privilégiée. Dans ces alliages, la présence de dislocations d'interface modifie également la morphologie des interfaces et conduit à l'apparition de dentelures.

Aux températures élevées où la microstructure évolue, la diffusion des lacunes est également activée. L'absorption et l'émission de lacunes par les dislocations conduit à un changement de leur plan de glissement. Ce mouvement hors-plan est désigné sous le terme de montée. Lorsque la montée des dislocations est activée, les interactions

entre dislocations et précipités sont différentes de celles qui prédominent à plus basse température.

Etudes précédentes

Pour prédire ces interactions complexes, il faut disposer d'outils de simulation capables de décrire à la fois le mouvement des dislocations par glissement et par montée ainsi que l'évolution des précipités.

On pourrait penser de prime abord que les techniques à l'échelle atomique de type *ab initio* ou dynamique moléculaire sont les plus adaptées car elles prennent en compte l'ensemble des détails des configurations atomiques. Ainsi, les dislocations apparaissent naturellement comme des arrangements atomiques particuliers. Par exemple Tsuru et al. (Tsuru 07) ont utilisé la dynamique moléculaire pour caractériser la nucléation de dislocations autour d'une inclusion d'alumine dans une matrice d'aluminium. Cependant, si ces simulations permettent de dévoiler et de comprendre les mécanismes complexes intervenant à l'échelle atomique, la simulation de systèmes représentatifs d'une microstructure nécessite souvent un temps de calcul prohibitif. De plus, ces simulations ne permettent pas d'atteindre les échelles de temps caractéristiques de la diffusion donc de l'évolution microstructurale.

La Dynamique des Dislocations permet quant à elle d'explorer des échelles d'espace plus importantes. Cette méthode consiste à discrétiser les lignes de dislocation et à faire évoluer chaque brin en fonction de la contrainte locale. Cette technique, développée au sein du laboratoire, est un outil de choix pour étudier le comportement collectif des dislocations en interactions avec une microstructure figée. C'est le cas des travaux de thèse d'Aurélien Vattré (Vattré 09b) qui ont porté sur le comportement des dislocations dans les superalliages à base nickel. Néanmoins, les interactions entre dislocations reposent sur des règles locales qui ne dérivent pas d'un cadre thermodynamique. De fait, il est difficile de développer cette technique afin de prendre en compte l'évolution des précipités.

Les approches champ de phase sont des méthodes puissantes permettant d'étudier des problèmes variés tels que les transformations liquide-solide, la rupture, et les transformations de phase à l'état solide. Ces méthodes, basées sur des équations continues dérivées dans un cadre thermodynamique cohérent, ont été largement développées au laboratoire dans le cadre de plusieurs travaux de thèses : Guillaume Boussinot (Boussinot 07) a développé un modèle champ de phase pour les alliages Ni-Al afin d'étudier la cinétique de croissance des précipités γ' et leur transition morphologique. Anaïs Gaubert (Gaubert 09) et Maeva Cottura (Cottura 13) ont poursuivi ces travaux de recherche en couplant le modèle champ de phase à différents modèles de plasticité continue afin de caractériser les interactions entre plasticité et microstructure et d'étudier le comportement mécanique de ces alliages en fluage. Umut Salman (Salman 09) a développé un formalisme champ de phase dérivant d'un Lagrangien pour étudier les transformations de phase martensitiques. L'application du formalisme champ de phase au glissement des dislocations a été initié lors du séjour post-doctoral de David Rodney au laboratoire (Rodney 01, Rodney 03). Cette technique a ensuite connu un certain essor (Wang 01, Shen 03) et a été appliquée à de nombreux problèmes mettant en jeu des interactions entre dislocations et microstructure (Wang 03, Zhou 07, Vorontsov 10, Wang 10, Zhou 11). Néanmoins, ces approches présentent des difficultés à prédire la nucléation et le glissement dévié des dislocations. Par ailleurs, il leur est également impossible de prendre en compte la montée des dislocations, un mécanisme important à haute température.

Objectif et démarche

Cette étude consiste à poser les bases de modèles variationnels capables de prendre en compte les mécanismes de glissement dévié et de montée des dislocations. Cette étude sert l'objectif plus ambitieux de construire un modèle thermodynamique cohérent capable de modéliser les interactions complexes entre dislocations et microstructures en évolution en tenant compte de manière réaliste du glissement dévié ainsi que de la montée des dislocations.

Ce travail se décompose en quatre chapitres qui constituent quatre étapes de ces travaux de thèse.

Dans le chapitre 1, nous proposons un modèle d'élasticité périodique permettant de simuler le comportement des dislocations. Après avoir décrit les précédents modèles de champ de phase des dislocations, nous présentons ce modèle ainsi que les avantages qu'il présente comparé aux approches précédentes. Ce chapitre présente également des éléments de validation qui montrent que le modèle proposé reproduit bien les caractéristiques principales des dislocations.

Dans le chapitre 2, nous appliquons ce modèle à l'étude de la perte de cohérence de précipités. Ces mécanismes, qui interviennent dans de nombreuses situations où les écarts paramétriques entre précipités et matrice sont importants ont été peu étudiés jusqu'ici. De plus, ces processus font intervenir la nucléation de dislocations ainsi que le glissement dévié, deux mécanismes qui sont naturellement pris en compte dans le modèle proposé dans le chapitre 1.

Dans le chapitre 3, nous proposons un couplage entre ce modèle et une méthode de champ de phase tenant compte de l'évolution microstructurale. Nous pouvons ainsi modéliser les interactions entre dislocations et évolutions microstructurales dans un contexte thermodynamique cohérent. Le système modèle étudié dans ce chapitre est l'alliage Al-Sc.

Dans le chapitre 4, nous proposons un modèle champ de phase pour l'étude de la montée des dislocations par absorption/émission de lacunes. Une attention particulière est apportée à l'influence de la cinétique du processus d'absorption/émission et des interactions élastiques entre lacunes et dislocations, dont les effets sont en général négligés.

MODÈLE D'ÉLASTICITÉ NON-LINÉAIRE POUR LA DYNAMIQUE DES DISLOCATIONS

1

Dans ce chapitre, nous proposons un modèle d'élasticité non-linéaire permettant d'étudier la dynamique des dislocations. Il se distingue des approches champ de phase habituelles par sa capacité à prendre en compte naturellement la nucléation et le glissement dévié des dislocations vis ainsi que par le fait qu'il ne repose sur aucun champ supplémentaire.

Dans un premier temps, nous présentons dans la partie 1.1 les modèles de type Frenkel-Kontorova et Peierls-Nabarro ainsi que les techniques champ de phase pour les dislocations, des modèles qui sont proches de l'approche que nous proposons ici. Ensuite, la partie 1.2 expose le modèle d'élasticité non-linéaire. Enfin la partie 1.3 présente différents éléments de validation qui assurent que le modèle reproduit bien les propriétés essentielles des dislocations. En particulier, nous verrons que la structure de cœur des dislocations est proche de la solution de Peierls-Nabarro et que les champs de contraintes à longue distance sont correctement reproduits. Enfin, nous verrons que le modèle reproduit bien la dynamique visqueuse des dislocations.

1.1 Modélisation continue des dislocations

Par opposition à la dislocation de Volterra qui est définie comme un défaut dans un matériau continu et parfaitement élastique (Hirth 68), les approches présentées dans cette section s'attachent à prendre en compte l'influence de la périodicité du réseau sur les propriétés des dislocations, en particulier sur la structure de cœur de celles-ci. Ces différents modèles ont pour point commun de reposer sur un équilibre entre une contribution élastique linéaire et un potentiel périodique représentatif du réseau cristallin.

1.1.1 Le modèle de Frenkel-Kontorova (MFK)

Frenkel et Kontorova (Frenkel 39) proposent un modèle unidimensionnel contenant l'essentiel de la physique de la dislocation, c'est-à-dire l'élasticité du milieu et la périodicité du réseau cristallin. Ce modèle est présenté dans de nombreux ouvrages de référence, en particulier (Hirth 68) duquel nous reprenons les principales étapes. Le modèle de Frenkel-Kontorova (MFK) s'attache à étudier le comportement d'une chaîne de masses reliées entre elles par des ressorts évoluant dans un paysage énergétique périodique (voir Fig. 1.1). Dans ce modèle simple, une dislocation coin peut être vue comme un défaut le long de la ligne élastique où deux masses successives sont positionnées dans

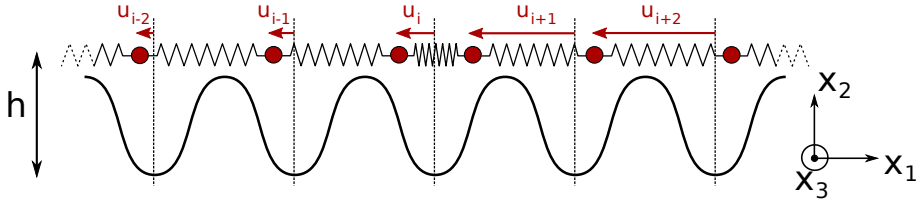


FIGURE 1.1 – Une dislocation coin dans le MFK.

le même puits du potentiel périodique. Les masses représentent les atomes du plan supérieur au plan de glissement et le potentiel périodique l'interaction non-linéaire entre les plans cristallins.

L'énergie du modèle s'écrit comme la somme d'une contribution périodique et d'une contribution élastique, fonctions des déplacements u_i vis-à-vis d'un réseau de référence correspondant aux minima du potentiel périodique :

$$E = \sum_{i=1}^N A \left(1 - \cos \left(\frac{2\pi u_i}{b} \right) \right) + \frac{B}{2b^2} (u_{i+1} - u_i)^2 \quad (1.1)$$

où b désigne le vecteur de Burgers. L'équilibre de la chaîne s'écrit en annulant les dérivées de l'énergie en fonction des degrés de liberté du système. On obtient donc le système d'équations :

$$\frac{2\pi A}{b} \sin \left(\frac{2\pi u_i}{b} \right) - \frac{B}{b^2} (-2u_i + u_{i-1} + u_{i+1}) = 0 \quad (1.2)$$

Afin de déterminer analytiquement la structure de cœur d'une dislocation décrite par le MFK, on passe à la limite continue en supposant que les déplacements varient faiblement d'une masse à l'autre ($\|u_i - u_{i-1}\| \ll b$). En notant $u(x)$ une fonction qui décrit les déplacements du système continu, et en effectuant un développement de Taylor à l'ordre 2 de u_{i+1} et de u_{i-1} autour de u_i , le système d'équations se réduit à la version stationnaire de l'équation de sine-Gordon¹ :

$$\frac{2\pi A}{b} \sin \left(\frac{2\pi u}{b} \right) - B \frac{d^2 u}{dx^2} = 0 \quad (1.3)$$

Les préfacteurs A et B peuvent être déterminés en fonctions des géométries du problème et des constantes élastiques du matériau. On suppose que l'on est en déformations planes ($\varepsilon_{22} = 0$) et que le problème est invariant suivant x_3 donc $\sigma_{33} = 0$. Pour un matériau isotrope de module d'Young E , de coefficient de poisson ν et de module de cisaillement μ , on a

$$\frac{du}{dx} = \varepsilon_{11} = \frac{\sigma_{11} - \nu \sigma_{22}}{E} = \sigma_{11} \frac{(1 - \nu^2)}{E} = \sigma_{11} \frac{(1 - \nu)}{2\mu} \quad (1.4)$$

Le préfacteur B s'exprime donc en fonction des constantes élastiques du matériau : $B = 2\mu/(1 - \nu)$. Le préfacteur du potentiel périodique est choisi pour retrouver la contribution de cisaillement de l'élasticité linéaire. En notant h la distance inter-plans (suivant x_2), on a $A = \mu b^2 / 4\pi^2 h^2$. On obtient finalement l'équation

$$\zeta^2 \frac{d^2 u(x)}{dx^2} = \frac{b}{2\pi} \sin \left(\frac{2\pi u(x)}{b} \right) \quad \text{avec} \quad \zeta = \frac{h}{\sqrt{1 - \nu}} \quad (1.5)$$

1. On peut faire remarquer que le développement de Taylor aux ordres supérieurs fait apparaître des termes pouvant être interprétés comme une réminiscence de la nature discrète du modèle initial.

Les conditions aux limites correspondant à une dislocation coin en $x = 0$ sont $u(-\infty) = 0$, $u(+\infty) = -b$, $\left.\frac{du}{dx}\right|_{-\infty} = \left.\frac{du}{dx}\right|_{+\infty} = 0$. La fonction $u(x)$ solution de l'équation 1.5 avec ces conditions aux limites et correspondant à une dislocation en 0 s'écrit :

$$u(x) = \frac{2b}{\pi} \arctan\left(e^{-x/\xi}\right) - b \quad (1.6)$$

Cette fonction est caractéristique d'un profil localisé en $x = 0$ avec une échelle de longueur ξ . Une application numérique pour $\nu = 1/3$ et $b = h$ donne $\xi \simeq 1.22b$. La figure 1.3 montre la solution $u(x)$ pour ces mêmes paramètres et la compare avec la solution du modèle de Peierls-Nabarro dérivée dans le paragraphe suivant.

Afin de mieux appréhender les limitations du MFK, on peut calculer les contraintes de cisaillement dans le plan de glissement :

$$\sigma_{12}(x) = \frac{\mu b}{2\pi h} \sin\left(\frac{2\pi u(x)}{b}\right) = \frac{\mu b}{h\pi} \frac{\tanh(x/\xi)}{\cosh(x/\xi)} \quad (1.7)$$

À longue distance, les contraintes décroissent en $e^{-x/\xi}$, ce qui est en contradiction avec le comportement en $1/x$ caractéristique des champs de contraintes autour d'une dislocation parfaite (Hirth 68). Ceci est dû au fait que le MFK est uni-dimensionnel et est davantage représentatif d'une chaîne atomique en surface. En d'autres termes, le MFK ne prend pas en compte la réponse élastique d'un matériau tridimensionnel infini. De plus, les déplacements suivant l'axe x_2 sont négligés.

Des extensions du MFK ont été proposées par la suite. On peut noter les travaux de Landau et al. (Landau 93, Landau 94) qui proposent une extension à deux dimensions du MFK original tout en conservant une seule composante du champ de déplacements. Elle est utilisée pour étudier l'équilibre et la dynamique de dipôles de dislocations. Carpio et Bonilla reprennent (Carpio 03a) et étendent ce modèle à trois dimensions en prenant en compte trois composantes du déplacement (Carpio 05). Les auteurs proposent également une méthode pour généraliser le MFK à une symétrie quelconque en utilisant un repère non orthonormé conforme au réseau cristallin. Les cas particuliers d'une symétrie cubique faces centrées et cubique centrée sont étudiés. Cependant, cette approche ne permet pas de prendre en compte les 12 systèmes de glissement de ces structures cristallines.

1.1.2 Le modèle de Peierls-Nabarro (MPN)

L'approche de Peierls (Peierls 40) reprise et corrigée par Nabarro (Nabarro 47) repose sur les mêmes ingrédients que le MFK mais pallie certaines limitations de ce dernier en proposant une solution analytique simple qui prend en compte la réponse élastique du matériau autour de la dislocation.

Le cœur des dislocations dans le MPN

Le MPN est amplement détaillé dans de nombreux ouvrages de référence (Hirth 68, Hull 84, Lu 05). Nous suivrons l'approche proposée par Joós et al. (Joós 97) qui se distingue des raisonnements habituels en définissant les déplacements à partir d'une référence plus claire. Bien évidemment, les différentes approches conduisent aux mêmes résultats.

On considère deux demi-volumes qui se comportent de manière élastique et qui interagissent via un potentiel non-linéaire périodique (figure 1.2). Le comportement

élastique des demi-volumes est supposé isotrope avec μ la constante élastique de cisaillement et ν le coefficient de Poisson. On note b la norme du vecteur de Burgers et h la distance entre deux plans atomiques dans la direction x_2 . Les déplacements sont définis à partir de la configuration de référence d'un cristal parfait constitué de mailles cubiques de côté h . Une dislocation est introduite en $(x_1 = 0, x_2 = 0)$ en effectuant un déplacement $u_1(x_1 > 0, x_2 > 0) = -b$ sur la moitié du demi-volume supérieur (figure 1.2). En notant x la coordonnée suivant l'axe x_1 , on définit $f(x) = u_1^+(x) - u_1^-(x)$ la différence de déplacement entre le volume supérieur et le volume inférieur au plan de glissement.

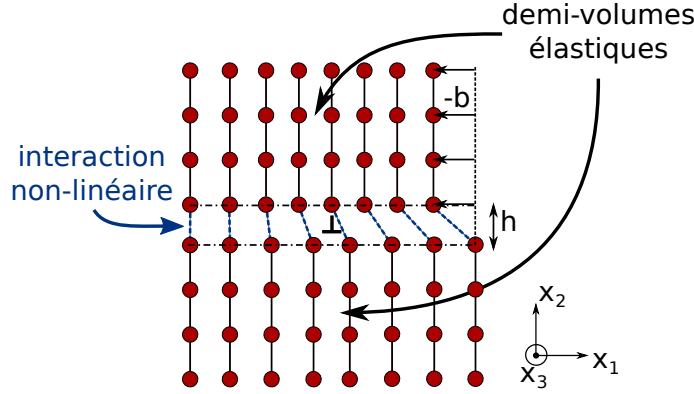


FIGURE 1.2 – Schéma de principe du MPN.

L'énergie du système est la somme de l'énergie élastique des deux demi-volumes et d'une énergie de faute d'empilement notée $\gamma(f(x))$ qui est fonction de la différence de déplacement $f(x)$. On peut dériver une contrainte de cisaillement dans le plan de glissement de la dislocation due à cette faute d'empilement :

$$F(f(x)) = \frac{\partial \gamma(f(x))}{\partial f(x)} \quad (1.8)$$

Le gradient de $f(x)$ correspond à une distribution de dislocations de caractère coin de vecteur de Burgers $db(x)$ réparties le long du plan de glissement telle que :

$$db(x) = -\frac{df(x)}{dx} dx \quad (1.9)$$

La réponse élastique d'un milieu continu isotrope à une dislocation située en x' de vecteur de Burgers infinitésimal $db(x')$ est donnée par la solution analytique d'une dislocation coin (Hirth 68). Ainsi, dans le plan de glissement, la contrainte de cisaillement en x issue d'une dislocation placée en x' est $d\sigma_{xy}(x) = \frac{\mu}{2\pi a_e} \frac{db(x')}{x-x'}$, avec $a_e = (1-\nu)$. Lorsque le système est à l'équilibre, cette contrainte s'équilibre avec la contrainte dérivée de l'énergie de faute d'empilement. Cette égalité est appelée équation de Peierls-Nabarro :

$$\frac{\mu}{2\pi a_e} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df(x')}{dx'} \frac{dx'}{x-x'} = F(f(x)) \quad (1.10)$$

Pour reproduire la périodicité du réseau cristallin, $\gamma(f(x))$ présente nécessairement une périodicité de b . On suppose qu'elle prend la forme simple suivante :

$$\gamma(f(x)) = \frac{\mu b^2}{4\pi^2 h} \left(1 - \cos \left(\frac{2\pi f(x)}{b} \right) \right) \quad \text{donc} \quad F(f(x)) = \frac{\mu b}{2\pi h} \sin \left(\frac{2\pi f(x)}{b} \right) \quad (1.11)$$

Le préfacteur est choisi afin de retrouver l'élasticité linéaire pour les petites déformations : $F(f) \simeq \mu f/h = 2\mu\epsilon_{12}$. Avec les conditions aux limites $f(x = -\infty) = 0$ et $f(x = +\infty) = -b$, l'équation 1.10 admet pour unique solution la fonction suivante :

$$f(x) = -\frac{b}{\pi} \arctan\left(\frac{x}{\xi}\right) - \frac{b}{2} \quad \text{avec} \quad \xi = \frac{h}{2a_e} = \frac{h}{2(1-\nu)} \quad (1.12)$$

La solution 1.12 permet de déduire la distribution complète des contraintes autour de la dislocation (Hirth 68). En particulier, les contraintes de cisaillement dans le plan de glissement peuvent être déterminées en injectant la solution 1.12 dans la seconde partie de l'équation 1.11. Après calculs, on trouve :

$$\sigma_{xy}(x, y = 0) = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x}{x^2 + \xi^2} \quad (1.13)$$

Ainsi, lorsque $x \gg \xi$, on retrouve bien le comportement en $1/x$ de la solution analytique d'une dislocation de Volterra.

La solution $f(x)$ pour $b = h$ et $\nu = 1/3$ est représentée sur la figure 1.3 où elle est comparée à la solution $u(x)$ du MFK pour les mêmes paramètres. Ces deux grandeurs sont comparables car elles représentent la différence de déplacement entre les plans atomiques situés au dessus et en dessous du plan de glissement. Ainsi, on note que les solutions des modèles MPN et MFK sont qualitativement comparables et font émerger un cœur de dislocation caractérisé par une échelle de longueur. Bien que proches, ces échelles de longueur sont différentes tout comme l'allure générale des cœurs. De plus, comme mis en évidence précédemment, les comportements à longue distance sont très différents.

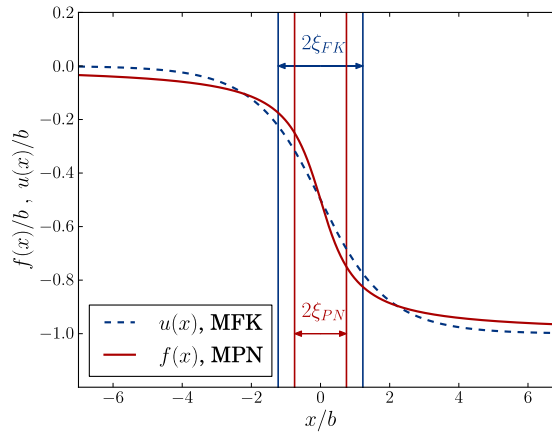


FIGURE 1.3 – solutions $u(x)$ pour le MFK et $f(x)$ pour le MPN avec les paramètres $b = h$ et $\nu = 1/3$

L'analyse de Peierls-Nabarro présentée ci-dessus est directement transposable au cas d'une dislocation vis en remplaçant le facteur $a_e = (1 - \nu)$ par $a_s = 1$. Ainsi, le cœur de la dislocation vis est plus étroit que celui de la dislocation coin.

La contrainte de Peierls

Jusqu'à présent, le MPN est exprimé dans un continuum. La discrétisation du modèle sur un réseau dont le pas est égal à la distance inter-atomique fait apparaître une friction de réseau, et une contrainte seuil qu'il faut dépasser pour mettre en mouvement la dislocation. Cette contrainte est appelée contrainte de Peierls.

On déplace la dislocation d'une quantité ab par rapport à sa position initiale. On suppose que la contribution de l'énergie élastique reste constante lors de ce déplacement (l'essentiel de cette contribution étant portée par le comportement à longues distances du champ de déformation, peu sensible à la position de la dislocation vis à vis de la discrétisation du réseau) et que seule l'énergie de faute d'empilement est modifiée. Cette énergie est évaluée comme une somme discrète tenant compte de la périodicité du réseau cristallin. Dans les approches originales de Peierls (Peierls 40) et Nabarro (Nabarro 47), les auteurs considèrent que le cœur de la dislocation est large et que les rangées atomiques supérieures sont arrangées en quiconque par rapport aux rangées atomiques inférieures au plan de glissement. La somme discrète porte sur les "atomes" des plans cristallins supérieurs et inférieurs au plan de glissement. L'énergie doit être divisée par 2 pour tenir compte du fait que c'est une énergie d'interaction :

$$E_1(\alpha) = \frac{b}{2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} [\gamma(f(nb - \alpha b)) + \gamma(f(nb + b/2 - \alpha b))] \quad (1.14)$$

Le choix de la forme générale de cette somme est discutable car elle est valable uniquement dans le cœur et non à longue distance. On peut également noter qu'on néglige les déplacements de la configuration relaxée et on suppose que la distance séparant deux plans cristallins consécutifs dans la direction x_1 est b . Après quelques manipulations, on réécrit cette énergie sous la forme :

$$E_1(\alpha) = \frac{\mu b^2 \zeta^2}{4\pi^2 h} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \frac{1}{\zeta^2/b^2 + (n/2 - \alpha)^2} \quad (1.15)$$

On peut calculer cette somme en utilisant la formule de sommation de Poisson². Par simplicité, on ne calcule que les termes de plus bas ordre ($n = -1, 0, 1$). Les termes d'ordres supérieurs conduisent à des contributions négligeables. Après calcul, on obtient l'énergie de la dislocation en fonction de sa position, appelée énergie de Peierls :

$$E_1(\alpha) \simeq \frac{\mu b^2 \zeta}{2\pi h} (1 + 2 \cos(4\pi\alpha) e^{-4\pi\zeta/b}) \quad (1.16)$$

On en déduit la contrainte de Peierls comme la contrainte maximale dérivée de cette énergie :

$$\sigma_{p,1} = \max_{\alpha} \left[\frac{1}{b^2} \frac{\partial E_1(\alpha)}{\partial \alpha} \right] = \frac{2\mu}{a_e} e^{-4\pi\zeta/b} \quad (1.17)$$

Dans ce développement, l'énergie de Peierls de la dislocation (équation 1.16) possède une période de $1/2$. Ainsi, la dislocation retrouve un minimum d'énergie si on la déplace d'une distance $b/2$, ce qui paraît erroné étant donné que la périodicité du cristal est b .

Plusieurs auteurs (Hirth 68, Christian 70, Joós 97) soulignent le manque de justification physique de l'équation 1.16 et proposent une sommation de l'équation 1.14 non plus sur l'ensemble des "atomes" mais sur les "liaisons" entre les atomes du plan supérieur et ceux du plan inférieur :

$$E_2(\alpha) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \gamma(f(nb - \alpha b)) \quad (1.18)$$

2. Formule de sommation de Poisson :

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} f(n + \alpha) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-2i\pi kt} dt \right) e^{2i\pi k\alpha}$$

En suivant les étapes précédentes, on obtient une énergie de période 1 en α :

$$E_2(\alpha) \simeq \frac{\mu b^2 \xi}{2\pi h} (1 + 2 \cos(2\pi\alpha) e^{-2\pi\xi/b}) \quad (1.19)$$

La contrainte de Peierls déduite de cette deuxième approche devient :

$$\sigma_{p,2} = \frac{\mu}{a_e} e^{-2\pi\xi/b} \quad (1.20)$$

On remarque que l'exposant diffère d'un facteur 2 avec celui de l'équation 1.17. La contrainte de Peierls est donc très sensible à la méthode de sommation employée. Dans les deux cas, on note également la grande sensibilité à la largeur du cœur de la dislocation. Ainsi, la contrainte de Peierls d'une dislocation vis est significativement plus importante que celle d'une dislocation coin car $\xi_{vis} < \xi_{coin}$.

D'autres travaux présentent des extensions du modèle original de Peierls-Nabarro. On peut ainsi mentionner le modèle de Huntington (Huntington 55) qui prend en compte le déplacement suivant x_1 lors de la sommation de l'équation 1.14. Wang (Wang 96a, Wang 96b) montre que la double sommation permet de retrouver la bonne périodicité de l'énergie de Peierls si les déplacements atomiques sont mesurés à partir d'une référence différente. La contrainte de Peierls est dérivée ici en supposant un empilement cubique simple. Lu et al. (Lu 00) montrent l'importance de la nature de l'empilement en dérivant la contrainte de Peierls dans le cas où l'empilement atomique est quelconque.

Une vue d'ensemble de la littérature met en évidence un manque de consensus sur la technique de sommation de l'énergie (simple ou double sommation) et sur la contrainte de Peierls qui en résulte. Le débat provient de la façon arbitraire (donc nécessairement discutable) dont le caractère discret du réseau cristallin est introduit dans le modèle continu.

En conclusion, le MPN constitue une approche intéressante pour obtenir des informations qualitatives sur la structure de cœur des dislocations et sur les dépendances de la contrainte de Peierls. Cependant, sa simplicité ne permet pas d'en tirer des résultats quantitatifs comme en témoigne le relatif succès des comparaisons avec les résultats expérimentaux (Wang 96b, Nabarro 97, Ohsawa 97). Sa principale limitation réside dans le choix du potentiel non linéaire (équation 1.11) et de son caractère unidimensionnel. En effet, la plupart des matériaux sont caractérisés par des énergies de faute d'empilement (ou γ -surfaces) beaucoup plus complexes (Vitek 68). On peut noter que de nombreuses approches numériques (Joós 94, Bulatov 97, Denoual 04, Xiang 08) s'attachent à généraliser le MPN afin d'obtenir une structure de cœur et une contrainte de Peierls réalistes dans le cas d'une γ -surface quelconque.

1.1.3 Modèles de champ de phase pour les dislocations

Les approches de type champ de phase reposent sur la définition de champs continus qui caractérisent la présence de phases auxquelles sont attribuées des propriétés spécifiques (constantes élastiques, déformations libres, diffusivité, etc.). La dynamique de ces champs et donc des phases associées est donnée par des équations d'évolution locales dérivant d'une fonctionnelle thermodynamique (énergie libre ou lagrangien).

Une boucle de dislocation peut être vue comme une phase en forme de plaquette où le matériau a subi une déformation plastique (voir figure 1.4). Une fois cette équivalence - suggérée par Nabarro (Nabarro 51) - établie, on peut écrire une fonctionnelle thermodynamique pertinente respectant un certain nombre de propriétés propres aux

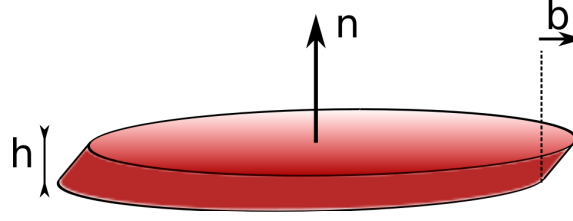


FIGURE 1.4 – Une boucle de dislocation vue comme une plaquette de seconde phase caractérisée par une déformation libre de cisaillement

dislocations pour déduire l'évolution des dislocations traitée au moyen d'équations dynamiques locales.

Le modèle champ de phase pour les dislocations (MCPD) a été introduit par Rodney et al. (Rodney 01) puis repris par Wang et al. (Wang 01). On considère n champs de phase notés ϕ_α représentant n systèmes de glissement et qui sont définis comme des fonctions de présence des phases associées aux différents systèmes de glissement. À chaque système de glissement est associé un vecteur de Burgers b^α , une normale au plan de glissement n^α et une déformation libre dont les composantes sont données par (Mura 87) :

$$\varepsilon_{ij}^{0,\alpha} = \frac{1}{2h_\alpha} (b_i^\alpha n_j^\alpha + b_j^\alpha n_i^\alpha) \quad (1.21)$$

où h_α désigne la distance entre deux plans de glissement. La déformation libre totale en un point r du système est simplement la somme des contributions des différents systèmes de glissement :

$$\varepsilon_{ij}^0(r) = \sum_{\alpha=1}^n \varepsilon_{ij}^{0,\alpha} \phi_\alpha(r) \quad (1.22)$$

Dans les approches champ de phase des dislocations, l'énergie libre du système est décomposée en trois termes, une énergie élastique, une énergie de gradient et une énergie cristalline rendant compte de la périodicité du réseau :

$$\mathcal{F} = E_{el}(\{\phi_\alpha\}, \{\varepsilon\}) + E_{grad}(\{\phi_\alpha\}) + E_{cryst}(\{\phi_\alpha\}) \quad (1.23)$$

L'énergie élastique est formulée dans le cadre de l'élasticité linéaire qui est supposée être valable même au cœur de la dislocation :

$$E_{el}(\{\phi_\alpha\}, \{\varepsilon\}) = \int d\mathbf{r}^3 \left\{ \frac{1}{2} C_{ijkl} (\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^0(\phi_\alpha)) (\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^0(\phi_\alpha)) - \sigma_{ij}^a \varepsilon_{ij} \right\} \quad (1.24)$$

où C_{ijkl} désignent les composantes du tenseur de rigidité, ε_{ij} les composantes du tenseur des déformations et σ_{ij}^a les composantes de la contrainte extérieure appliquée au système.

Le terme de gradient permet la régularisation des champs ϕ_i . L'énergie de gradient est évidemment prise nulle dans la direction normale au plan de glissement et non nulle dans les autres directions (Wang 01) et peut s'exprimer comme la somme suivante :

$$E_{grad} = \int \frac{B}{2} d\mathbf{r}^3 \left\{ \sum_{\alpha=1}^n (\nabla \phi_\alpha \wedge n_\alpha)^2 \right\} \quad (1.25)$$

L'énergie cristalline se présente sous la forme d'un potentiel périodique et permet de stabiliser les champs ϕ_α à des valeurs entières cohérentes avec la périodicité du réseau. Par simplicité, elle est souvent exprimée comme la somme suivante :

$$E_{cryst} = \int dr \left\{ \sum_{\alpha=1}^n \frac{A_{\alpha}}{2\pi^2} (1 - \cos(2\pi\phi_{\alpha})) \right\} \quad (1.26)$$

Dans la plupart des approches, chaque préfacteur A_{α} est pris égal à la constante élastique de cisaillement dans le repère associé au plan de glissement α . Ce choix permet en effet de retrouver la valeur attendue de l'énergie pour une petite déformation homogène de cisaillement. La compétition entre ces trois contributions énergétiques (équations 1.24, 1.25 et 1.26) fait naturellement apparaître une structure de cœur (c'est-à-dire un profil de ϕ) caractérisée par une taille et une énergie.

On décrit la dynamique des champs ϕ_{α} comme une dynamique dissipative non conservée pour laquelle la variation temporelle de ϕ_{α} est proportionnelle à la force thermodynamique, i.e. à la dérivée fonctionnelle de $\mathcal{F}$ par rapport au champ considéré (équation d'Allen-Cahn) :

$$\frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial t} = -L \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi_{\alpha}} \quad (1.27)$$

où L est un coefficient relié à la mobilité des dislocations. Cette dynamique assure que la vitesse des dislocations est proportionnelle à la force de Peach-Koehler résolue, c'est-à-dire à la contrainte locale de cisaillement dans le plan de glissement, ce qui est effectivement le cas pour un large domaine de contraintes (Kubin 13). Dans un tel régime, la vitesse de la dislocation est faible comparée à la vitesse du son dans le matériau. On peut donc supposer que les champs de déplacement atteignent l'équilibre instantanément comparé au mouvement de la dislocation. Pour assurer cette séparation d'échelles de temps, l'équilibre élastique est résolu dans le cadre des petites déformations à chaque pas de temps de l'équation 1.27 grâce aux fonctions de Green de l'élasticité (Khachaturyan 83).

Des extensions du MCPD ont été proposées pour traiter la propagation de dislocations dans un polycristal (Jin 01) et en présence de surfaces libres (Wang 03).

Shen et al. (Shen 03, Shen 04) ont montré qu'on peut relier l'énergie cristalline à une γ -surface issue de calculs atomiques et ainsi obtenir des structures de cœur réalistes. Le MCPD peut alors être vu comme une extension du MPN (Shen 04, Wang 10), faisant intervenir le même équilibre entre une énergie élastique et un potentiel périodique représentatif de la structure cristalline. On peut noter que la résolution du cœur des dislocations nécessite l'utilisation d'un pas de discrétisation comparable à la distance interatomique, ce qui peut rendre ces calculs coûteux. On peut également remarquer que le terme de gradient régularise la structure de cœur en pénalisant les variations spatiales du champ de phase (Shen 04, Wang 10). Cette formulation du MCPD a été utilisée pour étudier les structures de cœur aux nœuds d'un réseau bidimensionnel de dislocations (Shen 04).

Une des limitations du MCPD dans sa formulation originale réside dans le choix du pas de discrétisation. Pour reproduire une structure de cœur et une tension de ligne réalistes, le pas de discrétisation doit en effet être de l'ordre de grandeur de la distance interatomique. Ceci conduit à une limitation importante des dimensions des simulations. Pour contourner cette limitation, Zhou et al. (Zhou 11) incorporent un terme correctif afin de reproduire une tension de ligne correcte pour un pas de grille de l'ordre du nanomètre.

L'avantage du modèle de champ de phase réside dans le fait qu'il peut être couplé facilement avec une microstructure environnante (par exemple des précipités de seconde phase) caractérisée par une distribution de déformations libres. Cet avantage a

été particulièrement utilisé pour l'étude des interactions entre dislocations et microstructure dans le cas des superalliages à base nickel. Ces alliages présentent des précipités γ' ordonnés de structure L_{12} distribués dans une phase γ désordonnée. Zhou et al. (Zhou 07) couplent le MCPD avec un modèle champ de phase tenant compte de l'évolution microstructurale afin de modéliser l'impact de la plasticité sur la transformation morphologique des précipités γ' à haute température (mise en radeaux). Vorontsov et al. (Vorontsov 10) utilisent le MCPD pour étudier le cisaillement des précipités γ' par des super-dislocations de type $a[112]$.

Malgré leur capacité à décrire le comportement des dislocations dans des situations variées et complexes, la formulation du MCPD et les études qui en découlent nécessitent l'utilisation des termes de gradient pour assurer la régularisation spatiale des champs de phase. Ces termes de gradient sont hérités d'une formulation traditionnelle des méthodes de champ de phase, où l'énergie libre est écrite sous la forme d'un double-puits et d'un terme de gradient. Une justification formelle de ces termes nécessiterait une analyse précise du passage à la limite continue d'un modèle initialement discret. Dans ce type d'analyse, les termes inhomogènes, initialement écrits sous la forme de différences finies, ne peuvent être approchés par une simple dérivée première que si les variations spatiales des champs correspondants sont petites vis à vis du pas de discrétisation. Ce n'est bien sûr pas le cas des dislocation, où la longueur du cœur est comparable à la distance interatomique. Dans les approches MCPD, la morphologie des cœurs n'est donc que très approximativement reproduite. Cela n'a pas d'influence sur les champs élastiques à longue distance, mais peut par contre fortement modifier les mécanismes qui opèrent à l'échelle du cœur. C'est en particulier le cas du glissement dévié des dislocations vis, problème qui n'a pas été jusqu'alors étudié par cette méthode. Il est cependant fort probable que ces termes de gradient conduiraient à l'apparition d'artefacts importants. Dans le MCPD, le glissement dévié devrait être décrit au moyen de deux champs de phases différents (un pour chaque plan de glissement). À l'endroit où la dislocation amorce le glissement dévié, des énergies de gradient résiduelles persisteraient, ce qui perturberait probablement ces mécanismes. De même, les termes de gradient sont susceptibles de jouer un rôle au cours de la nucléation des dislocations et peuvent également modifier de tels événements.

Rodney et al. (Rodney 03) ont proposé une extension du MCPD permettant l'utilisation d'un pas de grille plus large tout en conservant une structure de cœur réaliste. Contrairement à la formulation initiale du MCPD, les termes énergétiques de gradient et d'énergie cristalline n'apparaissent pas dans cette formulation. Le champ de phase représentant la déformation plastique est composé d'une superposition de boucles élémentaires appelées *lopoons*. Les équations sont discrétisées avec un pas de grille indépendant du vecteur de Burgers et une méthode d'intégration dans l'espace de Fourier permet de retrouver des cœurs réalistes et leur interactions à courte distance. La dynamique utilisée diffère également des approches précédentes. Malgré les potentialités intéressantes de ce modèle pour traiter le comportement des dislocations à plus grande échelle, il a été peu utilisé par la suite.

Koslowski et al. (Koslowski 02) proposent également un modèle champ de phase permettant d'accéder à des échelles d'espace plus grandes. Les auteurs se restreignent à l'étude d'un seul système de glissement. Le modèle repose sur l'introduction d'un champ qui ne prend que des valeurs entières et qui représente la déformation plastique normalisée, ou de manière équivalente, le nombre de dislocations passées en chaque point. Tout comme dans (Rodney 03), les auteurs ne prennent pas en compte les termes de gradient. Les seules contributions sont l'énergie élastique et une énergie cristalline quadratique par morceaux. Cette forme particulière du potentiel cristallin permet la

résolution analytique des champs élastiques et plastiques dans l'espace de Fourier en utilisant les fonctions de Green de l'élasticité. Les auteurs vérifient la cohérence de leur formulation avec les solutions analytiques pour l'énergie d'une dislocation vis et coin. L'évolution du système composé d'une microstructure de dislocations est obtenue par une méthode de minimisation incrémentale de l'énergie, qui peut s'apparenter à une dynamique dissipative. L'introduction d'obstacles dans le plan de glissement permet d'étudier le durcissement structural (Koslowski 02, Koslowski 04, Koslowski 07).

1.1.4 Modèles d'élasticité périodique pour des dislocations

Pour l'étude des transformations de phase martensitiques, certaines approches (Ahluwalia 01, Salman 09, Shchyglo 12) reposent sur une énergie élastique non linéaire et évitent l'introduction de champs supplémentaires nécessaires dans les approches champ de phase précédentes. L'énergie élastique est paramétrée afin de retrouver des minima pour des états de déformation correspondant aux différents variants de la martensite. Cette technique présente l'avantage de prendre en compte facilement le rôle de l'inertie et des grandes déformations, deux éléments qui influencent beaucoup la dynamique de la transformation de phase et la microstructure finale (Salman 09).

Comme précédemment, le mouvement d'une dislocation peut être vu comme une transformation de phase displacive entre une phase non cisailée et une phase cisailée. Ainsi, les modèles proposés pour les transformations martensitiques peuvent être transposés à la dynamique des dislocations. Étant donné que l'on doit retrouver un minimum d'énergie après le passage d'un nombre quelconque de dislocations sur un plan de glissement, le paysage énergétique est nécessairement périodique en fonction des déformations de cisaillement.

Cette approche a été suivie par Onuki et Minami (Onuki 03, Minami 04, Minami 05, Minami 07) avec différents modèles d'élasticité périodique destinés à l'étude des dislocations. Dans ces modèles, aucun terme de gradient n'est introduit dans la fonctionnelle d'énergie libre et les dislocations émergent naturellement. Dans (Onuki 03), l'énergie élastique est écrite comme la somme d'une contribution harmonique et d'une contribution périodique portant sur les déformations de cisaillement. Le potentiel périodique présente une invariance par rotation de $\pi/3$ afin de modéliser les systèmes de glissement d'un réseau triangulaire. Les différents champs sont discrétisés sur une grille de différences finies cubique où les déplacements et le tenseur des contraintes sont définis sur des grilles décalées. Cependant, comme souligné par l'auteur (Onuki 03), l'utilisation d'une grille à symétrie cubique empêche l'apparition des systèmes de glissement du réseau triangulaire car ils ne coïncident pas avec la grille de discrétisation.

Dans (Minami 04), les auteurs proposent un modèle similaire permettant de modéliser des systèmes de glissement orientés à $\pm\pi/4$ les uns par rapport aux autres, conformes à la grille de discrétisation cubique. Le modèle d'élasticité périodique proposé est couplé à un modèle de Cahn-Hilliard (Cahn 58) afin d'étudier les interactions entre dislocations et microstructures. Les auteurs étudient la nucléation de dislocations à l'interface entre précipité et microstructure et le comportement plastique qui en résulte. Ce modèle d'élasticité périodique est généralisé à 3 dimensions dans (Minami 05) et appliqué à l'étude du comportement plastique d'un alliage binaire.

Des améliorations du modèle initial sont également proposées pour tenir compte de l'évolution d'une population de lacunes (Onuki 03) et pour étudier le rôle des dislocations dans les phénomènes de précipitation et de décomposition spinodale (Minami 07).

Les travaux de Onuki et Minami décrits ci-dessus abordent une grande variété de problèmes complexes portant sur les interactions entre dislocations et évolution microstructurale. Cependant, les sujets abordés sont souvent survolés et les auteurs ne

cherchent en général qu'à montrer les possibilités du modèle sans détailler avec attention les différents mécanismes.

Salman et al. (Salman 11) proposent une version simplifiée de ce type de modèle où une seule composante des déplacements est prise en compte et un seul système de glissement est actif. Les auteurs utilisent cette approche pour étudier le caractère intermittent de l'activité plastique en 2D.

Il est important de noter qu'une fois discrétisés sur une grille de différences finies qui rend compte de l'aspect discret du réseau, ces modèles d'élasticité non linéaire sont très similaires aux approches de type Frenkel-Kontorova généralisées (Landau 93, Landau 94, Carpio 03a, Carpio 05) décrites dans le paragraphe 1.1.1.

1.2 Ecriture d'un modèle d'élasticité périodique

Nous proposons un modèle très similaire aux approches présentées dans (Onuki 03, Minami 04, Minami 05, Minami 07). Ce modèle repose sur l'introduction de potentiels périodiques directement dans l'écriture de l'énergie élastique. Ainsi, aucun champ supplémentaire n'est nécessaire pour décrire l'évolution du système. Les équations dynamiques sont choisies pour reproduire la dynamique visqueuse des dislocations.

1.2.1 Introduction du modèle d'élasticité périodique dans un cas simple

Contrairement aux approches champ de phase qui reposent sur la notion de déformation libre, l'approche proposée ici consiste à modifier l'énergie élastique de telle sorte que lorsque le matériau subit une déformation $\varepsilon_{ij} = \frac{k}{2h}(b_i n_j + b_j n_i)$ ($k \in \mathbb{Z}$), le système retrouve un minimum d'énergie. En d'autres termes, la périodicité du cristal est directement prise en compte dans l'écriture de l'énergie.

En particulier, considérons un matériau bidimensionnel élastique isotrope possédant un système de glissement qui a pour vecteur de Burgers $b = [1, 0]$ et pour normale $n = [0, 1]$. On peut écrire l'énergie élastique du système comme :

$$\mathcal{E}_{el} = \int dr^3 \left\{ \frac{\lambda + 2\mu}{2} (\varepsilon_{11}^2 + \varepsilon_{22}^2) + \lambda \varepsilon_{11} \varepsilon_{22} + p(\varepsilon_{12}) \right\} \quad (1.28)$$

où λ et μ sont les coefficients de Lamé. En choisissant $p(\varepsilon_{12}) = 2\mu \varepsilon_{12}^2$, on retrouve l'énergie d'un matériau isotrope en élasticité linéaire. En notant $\hat{\varepsilon} = b/2h$ la déformation caractéristique de la périodicité du cristal, on modifie l'énergie élastique afin de retrouver un minimum d'énergie lorsque $\varepsilon_{12} = \hat{\varepsilon}$. Pour tenir compte du passage de plusieurs dislocations, on veut également retrouver un minimum d'énergie pour toutes les valeurs de $\varepsilon_{12} = k\hat{\varepsilon}$, où k est un entier. Un choix naturel pour $p(\varepsilon_{12})$ est une fonction périodique de période $\hat{\varepsilon}$. Pour s'assurer de retrouver le comportement élastique linéaire pour les petites déformations, on choisit la fonction p telle que $p'(0) = 0$ et $p''(0) = 4\mu$. Une forme simple de p qui remplit ces conditions est :

$$p(\varepsilon_{12}) = \frac{\mu \hat{\varepsilon}^2}{\pi^2} [1 - \cos(2\pi \varepsilon_{12} / \hat{\varepsilon})] \quad (1.29)$$

En se plaçant dans le cadre des petites déformations, les composantes du tenseur de déformation sont définies à partir des déplacements u de la manière suivante dans un repère cartésien :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.30)$$

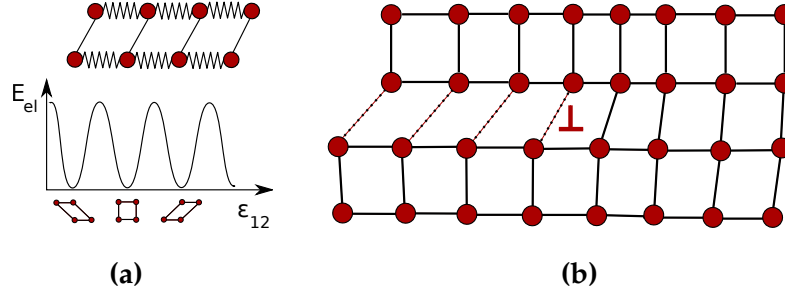


FIGURE 1.5 – (a) Schéma de principe du modèle d'élasticité non linéaire en 2D. (b) Une dislocation coin dans le modèle d'élasticité non linéaire.

Ces équations peuvent être discrétisées sur une grille de différences finies cubique dont le pas de discrétisation est égal au vecteur de Burgers b . Les déplacements peuvent être alors vus comme ceux d'atomes d'un cristal de symétrie cubique. La figure 1.5.a représente un schéma du modèle pour une telle discrétisation et la figure 1.5.b présente une dislocation coin. Dans cette représentation, la dislocation peut être vue comme une frontière entre deux parties du cristal dont les composantes de cisaillement sont dans 2 puits adjacents du potentiel périodique.

On peut remarquer que le choix d'inclure la déformation ϵ_{12} dans le potentiel périodique conduit à l'apparition du système de glissement orthogonal $b = [0, 1]$, $n = [1, 0]$. Ceci est dû à la symétrisation du tenseur de déformation.

1.2.2 Généralisation au cas 3D non isotrope

Cette démarche peut être généralisée au cas 3D non isotrope de manière directe.

Ecriture de l'énergie

On se place dans le cas d'un comportement élastique orthotrope (c'est-à-dire avec trois plans de symétrie orthogonaux deux à deux). Pour une telle symétrie, chaque composante de cisaillement est indépendante des autres composantes de déformation. On peut alors généraliser la démarche vue au paragraphe 1.2.1 et écrire l'énergie élastique du système comme :

$$\mathcal{E}_{el} = \int dr^3 \left[\sum_{i,j=1}^3 \frac{C_{ijij}}{2} (\epsilon_{ii} - \epsilon_{ii}^0)(\epsilon_{jj} - \epsilon_{jj}^0) + \sum_{i < j} p_{ij}(\epsilon_{ij} - \epsilon_{ij}^0) \right] \quad (1.31)$$

où ϵ_{ij}^0 désigne les éventuelles déformations libres issus d'une microstructure environnante (solution solide, précipités de seconde phase, etc.). On choisit les fonctions p_{ij} périodiques de période $\hat{\epsilon}$. Nous considérerons un potentiel périodique de la forme suivante :

$$\text{Pour } i < j, \quad p_{ij}(\epsilon_{ij}) = \frac{C_{ijij}\hat{\epsilon}^2}{\pi^2} \left[\left(\frac{\alpha}{2} + 1 \right) (1 - \cos(2\pi\epsilon_{ij}/\hat{\epsilon})) - \frac{\alpha}{8} (1 - \cos(4\pi\epsilon_{ij}/\hat{\epsilon})) \right] \quad (1.32)$$

où α est un paramètre sans dimension qui contrôle la forme générale du potentiel périodique comme illustré sur la figure 1.6. La paramétrisation du potentiel périodique est choisie de telle sorte que l'on retrouve l'élasticité linéaire lorsque $\epsilon \simeq k\hat{\epsilon}$ ($k \in \mathbb{Z}$), quel que soit le choix de α et $\hat{\epsilon}$. Nous verrons que le paramètre α permet de modifier les propriétés des dislocations telles que la structure de cœur et la contrainte de Peierls.

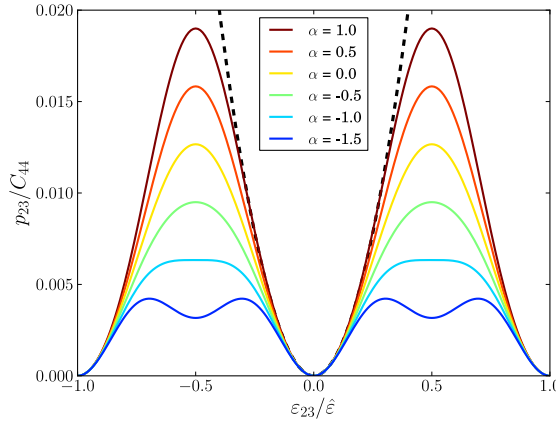


FIGURE 1.6 – Influence du paramètre α sur du potentiel périodique.

Il faut souligner que les fonctions périodiques sont ici construites de manière phénoménologique. Une autre démarche consisterait à construire ces fonctions à partir de γ -surfaces issues de calculs *ab initio*.

Comme nous l'avons déjà dit pour le cas simple 2D, l'écriture de l'énergie conditionne les systèmes de glissement que l'on peut modéliser. En particulier, la séparation des différentes composantes de cisaillement qui a été choisie dans l'équation 1.31 permet de modéliser les 6 systèmes de glissement de type (100)[001] correspondant aux systèmes de glissement d'une symétrie cubique simple.

Dynamique lagrangienne et choix du potentiel de dissipation

La seconde étape consiste à définir les équations dynamiques qui régissent l'évolution du système. Dans la mesure où parmi les degrés de liberté figurent les déplacements, il est naturel d'écrire une dynamique lagrangienne, en particulier pour prendre en compte les effets de l'inertie. On définit ainsi le lagrangien du système comme $\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{E}_{el}$ où $\mathcal{T}$ est l'énergie cinétique du système exprimée comme :

$$\mathcal{T} = \int dr^3 \frac{\rho}{2} \sum_i \dot{u}_i^2 \quad (1.33)$$

où ρ désigne la masse volumique du matériau que l'on suppose homogène. Lorsqu'un solide cristallin subit une déformation élastique ou plastique, l'énergie interne est dissipée sous forme de chaleur. Cette dissipation est introduite dans le formalisme de Lagrange par un potentiel de Rayleigh. Comme expliqué dans (Landau 67), un choix pertinent pour le potentiel de dissipation est de l'écrire sur les déformations. Il s'agit d'une dissipation interne : aucune énergie n'est dissipée si le solide subit une translation ou une rotation dans l'espace. En notant le coefficient de dissipation η , le potentiel de dissipation s'écrit comme :

$$\mathcal{R} = \int dr^3 \frac{\eta}{2} \sum_{i,j} \dot{\epsilon}_{ij}^2 \quad (1.34)$$

La dynamique de Lagrange-Rayleigh du système s'écrit finalement comme

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \dot{u}_i(r)} \right) = \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta u_i(r)} - \frac{\delta \mathcal{R}}{\delta \dot{u}_i(r)} \quad (1.35)$$

Le calcul du premier terme du membre de droite donne :

$$\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta u_i(r)} = \frac{\partial \sigma_{ij}(r)}{\partial x_j} \quad (1.36)$$

où les contraintes sont définies de manière usuelle $\sigma_{ij}(r) = \delta \mathcal{E}_{el} / \delta \varepsilon_{ij}(r)$. D'autre part,

$$\frac{\delta \mathcal{R}}{\delta \dot{u}_i(r)} = -\eta \frac{\partial \varepsilon_{ij}(r)}{\partial x_j} \quad (1.37)$$

On en déduit finalement les équations d'évolution locale :

$$\rho \ddot{u}_i = \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} + \eta \dot{\varepsilon}_{ij}) \quad (1.38)$$

Par combinaisons linéaires, on peut en déduire les équations d'évolution sur les déformations :

$$\rho \ddot{\varepsilon}_{ij} - \frac{\eta}{2} \left[\frac{\partial^2 \dot{\varepsilon}_{ik}}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 \dot{\varepsilon}_{jk}}{\partial x_i \partial x_k} \right] = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 \sigma_{ik}}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 \sigma_{jk}}{\partial x_i \partial x_k} \right] \quad (1.39)$$

On peut également considérer un potentiel de dissipation sur les déplacements :

$$\mathcal{R} = \int dr^3 \frac{\eta}{2} \sum_i \dot{u}_i^2 \quad (1.40)$$

Cette dissipation est qualifiée d'extrinsèque car la dynamique du système se comporte comme si chaque élément de volume "frottait" sur un substrat auquel il communique l'énergie dissipée. On en déduit les équations suivantes sur les déformations ε_{ij} :

$$\rho \ddot{\varepsilon}_{ij} + \eta \dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 \sigma_{ik}}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 \sigma_{jk}}{\partial x_i \partial x_k} \right] \quad (1.41)$$

Les équations qui en résultent sont plus aisées à résoudre numériquement. Pour des raisons de simplicité, on fera donc le choix de la dissipation extrinsèque.

On peut noter que les équations dynamiques 1.39 et 1.41 garantissent les conditions de compatibilité de Saint-Venant sur les déformations tout au long de l'évolution du système car elles sont directement déduites des équations dynamiques sur les déplacements (Salman 09).

Sur une large plage de contraintes, la dynamique des dislocations est fortement amortie du fait du mécanisme de traînée de phonons (Kubin 13). Une simplification de l'équation 1.41 consiste à négliger les termes inertiels, numériquement coûteux à prendre en compte. On verra qu'une simple dynamique dissipative permet de retrouver la dynamique amortie des dislocations. Une autre modification apportée à la dynamique d'Euler-Lagrange consiste à introduire un bruit de Langevin qui remplace qualitativement les fluctuations thermiques. Afin de conserver la compatibilité de Saint-Venant, cette contribution est écrite comme des déplacements aléatoires ξ . On obtient finalement les équations dynamiques suivantes :

$$\eta \dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 \sigma_{ik}}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 \sigma_{jk}}{\partial x_i \partial x_k} \right] + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \xi_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \right] \quad (1.42)$$

où les ξ_i sont des bruits blancs gaussiens tels que $\langle \xi_i(x, t) \xi_i(x', t') \rangle = \Gamma \delta(x - x') \delta(t - t')$ avec Γ un coefficient proportionnel à la température.

Cette approche présente deux avantages par rapport aux modèles de champ de phase des dislocations décrits dans la section 1.1.3 :

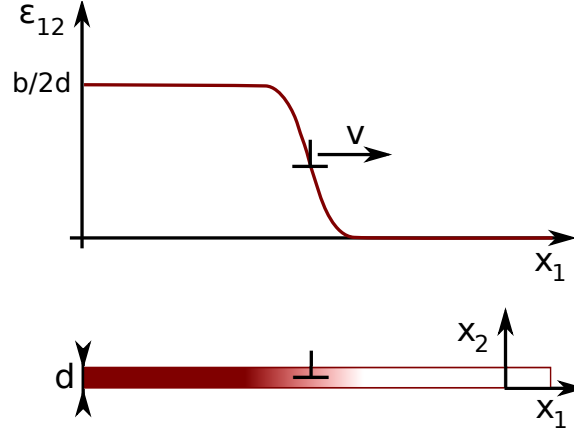


FIGURE 1.7 – Dislocation isolée dans un milieu infini.

- L'influence de l'inertie peut être facilement prise en compte dans les équations dynamiques. Ainsi, ce modèle peut être utilisé afin d'étudier les mécanismes de traînée de phonons comme l'ont effectué Carpio et al. (Carpio 03a, Carpio 03b) ou le comportement des dislocations à des vitesses élevées.
- On a choisi ici le cadre des petites déformations. Ce choix est discutable, notamment au niveau du cœur des dislocations où les déformations sont importantes. Afin de prendre en compte l'effet des grandes déformations sur la structure de cœur, le modèle peut être écrit en grandes déformations en suivant les travaux de Salman (Salman 09).

Au vu des objectifs de ces travaux de thèse (couplage avec des processus diffusifs), les effets de l'inertie ne sont pas pris en compte. On considère également que les grandes déformations ont peu d'influence sur les résultats obtenus et on conserve le formalisme des petites déformations par simplicité.

Analyse des équations dynamiques

Une analyse simple permet de montrer que les équations 1.42 en l'absence de bruit permettent de retrouver une dynamique dissipative sur les dislocations du type $vB = b\sigma^a$ où σ^a désigne la contrainte appliquée de cisaillement et B est un coefficient constant. Considérons pour cela une dislocation coin isolée dans un milieu infini et analysons la dynamique du champ ε_{12} dans son plan de glissement (figure 1.7).

Lorsque la dislocation est immobile (sans contrainte externe), l'équation 1.42 pour le champ ε_{12} se réduit à

$$\frac{\partial^2 \sigma_{11}^s}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial^2 \sigma_{12}^s}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{12}^s}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{22}^s}{\partial x_1 \partial x_2} = 0 \quad (1.43)$$

où l'exposant "s" indique le caractère stationnaire des champs de contrainte autour de la dislocation.

On applique maintenant une contrainte extérieure $\sigma_{12}^a \geq 0$ de telle sorte que la dislocation se déplace selon les x_1 croissants à une vitesse v . On choisit cette contrainte suffisamment petite par rapport aux contraintes dans le cœur de la dislocation pour qu'elle n'induisse qu'une petite perturbation $\varepsilon_{12}^a \simeq \sigma_{12}^a/2$ du champ de déformation. Les champs de contrainte σ_{11} et σ_{22} ne sont pas influencés par cette déformation et conservent leur profil stationnaire. En ré-exprimant l'équation 1.42 dans le repère mobile lié à la dislocation $(\bar{x}_1, \bar{x}_2) = (x_1 - vt, x_2)$ on obtient :

$$-v\eta \frac{\partial \varepsilon_{12}}{\partial \bar{x}_1} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 \sigma_{12}}{\partial \bar{x}_1^2} + \frac{\partial^2 \sigma_{12}}{\partial \bar{x}_2^2} \right] \quad (1.44)$$

Les contraintes de cisaillement sont écrites en fonction du potentiel périodique et un simple développement de Taylor permet d'obtenir :

$$\sigma_{12}(\varepsilon_{12}) = p(\varepsilon_{12}^s + \varepsilon_{12}^a) \simeq \sigma_{12}^s + \varepsilon_{12}^a p'(\varepsilon_{12}^s) \quad (1.45)$$

où p' désigne la dérivée de p par rapport à ε_{12} . L'utilisation de la relation 1.43 entre les composantes du champ de contrainte à l'équilibre permet d'obtenir l'équation suivante :

$$-v\eta \frac{\partial \varepsilon_{12}}{\partial \bar{x}_1} = \frac{\varepsilon_{12}^a}{2} \left[\frac{\partial p'(\varepsilon_{12}^s)}{\partial \bar{x}_1^2} + \frac{\partial p'(\varepsilon_{12}^s)}{\partial \bar{x}_2^2} \right] \quad (1.46)$$

Afin d'obtenir une expression de la vitesse, cette équation peut être intégrée sur un domaine $\{-\infty, \infty\} \times \{0, d\}$. Il est aisé de montrer que l'intégrale de $\partial \varepsilon_{12} / \partial \bar{x}_1$ vaut $-b/2$ et celle du premier terme du membre de droite est nulle. On en déduit l'expression suivante en utilisant la relation $\sigma_{12}^a = 2\mu \varepsilon_{12}^a$:

$$v\eta b = \frac{\sigma_{12}^a}{2\mu} \int_0^d \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial p'(\varepsilon_{12}^s)}{\partial \bar{x}_2^2} d\bar{x}_1 d\bar{x}_2 \quad (1.47)$$

On retrouve bien une relation linéaire entre la vitesse et la contrainte appliquée. On peut noter que le coefficient de proportionnalité dépend de la structure du cœur via l'intégrande $\partial p'(\varepsilon_{12}^s) / \partial \bar{x}_2^2$.

Un raisonnement similaire permet d'obtenir un résultat identique dans le cas d'une dislocation vis.

1.2.3 Implémentation numérique

En choisissant $d_c = b$ comme longueur caractéristique, $E_c = C_{1212}b^3$ comme énergie caractéristique et $t_c = \eta b^2 / C_{1212}$ comme temps caractéristique, les équations 1.31 et 1.42 sont tout d'abord normalisées.

Afin d'intégrer les équations d'évolution adimensionnées, les champs de déplacement et de déformations sont discrétisés sur une grille de différences finies cubique. Un choix naturel pour le pas de discrétisation noté d est la distance interatomique, c'est à dire la norme du vecteur de Burgers dans le cas d'un réseau cubique simple. Les champs de déplacement peuvent alors être vus comme le déplacement des atomes du réseau cubique simple (figure 1.8.a). Cependant, le pas de discrétisation peut être choisi indépendamment de la distance interatomique. En particulier, on peut discrétiser le modèle à une échelle plus large que l'échelle atomique. Le schéma de la figure 1.8 montre la même configuration atomique d'un cisaillement localisé sur un plan interatomique pour deux pas de discrétisation différents $d = b$ et $d = 10b$. Il est clair que pour une discrétisation $d = 10b$, les potentiels périodiques doivent présenter une fréquence 10 fois plus importante que pour une discrétisation $d = b$ afin de retrouver un minimum d'énergie dans la configuration représentée sur la figure 1.8.b. Ainsi, le paramètre $\hat{\varepsilon}$ dépend du pas de discrétisation, soit $\hat{\varepsilon} = b/2d$. Dans la section 1.3, on verra que ce paramètre influence les propriétés des dislocations.

Les équations 1.42 sont discrétisées sur 4 grilles décalées (Saenger 00, Carcione 02) représentées sur la figure 1.9. Les composantes diagonales des tenseurs de déformations et de contraintes sont définies sur la grille principale (losange vert) et chaque composante non diagonale est définie sur une grille complémentaire (carrés bleus). Les composantes du champ de déplacement qui interviennent indirectement dans les équations

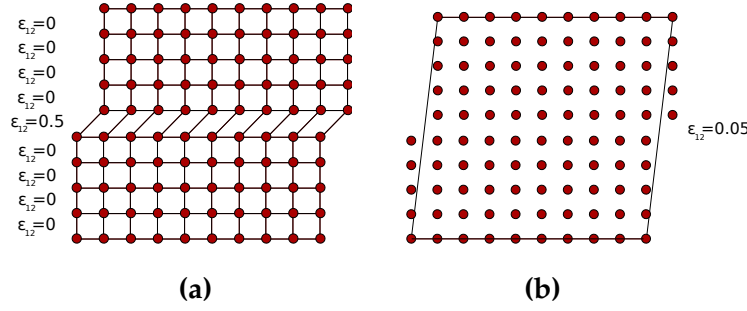


FIGURE 1.8 – Une même configuration atomique d'un cisaillement localisé sur le plan médian horizontal pour un pas de discrétisation $d = b$ (a) et $d = 10b$ (b).

dynamiques 1.42 sont définies sur 3 grilles (1 grille par composante) représentés par des cercles rouges sur la figure 1.9.

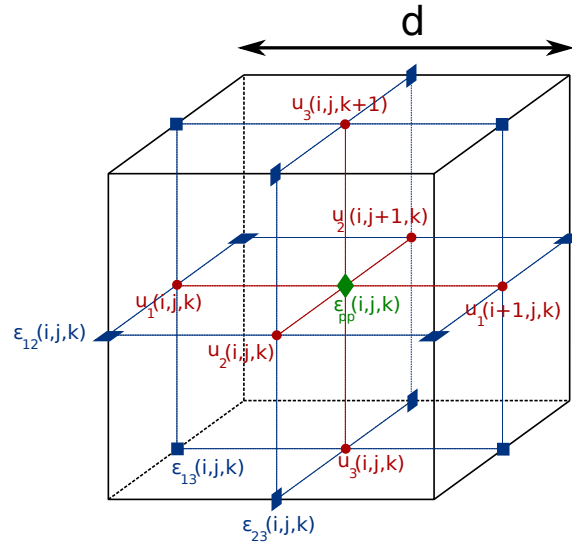


FIGURE 1.9 – 6 grilles décalées utilisées pour discrétiser en espace les équations différentielles du modèle.

Deux types de différences finies sont spécifiés sur les différentes grilles. Premièrement, les différences notées "+" définies par $D_1^+ \varphi = [\varphi(i+1, j, k) - \varphi(i, j, k)]/d$ où φ représente un champ quelconque et (i, j, k) sont les indices de numérotation des points de la grille dans les 3 directions de l'espace. L'indice 1 associé à l'opérateur D indique la direction suivant laquelle est effectuée la différence. De même, on définit les différences notées "-" par $D_1^- \varphi = [\varphi(i, j, k) - \varphi(i-1, j, k)]/d$. On peut noter que de telles différences finies ne font intervenir que les premiers voisins.

Les composantes du tenseur des contraintes sont définies à partir des composantes du tenseur de déformation définies sur la même grille, c'est-à-dire $\sigma_{ii} = \sum_{j=1}^3 C_{ii jj} \varepsilon_{jj}$ sur la grille principale (losange vert) et $\sigma_{ij} = p'(\varepsilon_{ij})/2$ pour $i \neq j$ sur les grilles auxiliaires (carrés bleus). Les composantes de la divergence du champ des contraintes apparaissant dans l'équation 1.42 sont exprimées sur 3 grilles différentes représentées par des points rouges où sont également définies les composantes u_i du champ de déplacement ainsi que les champs ζ_i . Ainsi, les différents termes de l'équation 1.42 sont définis sur la même grille, ce qui assure la cohérence du schéma numérique. Afin de simplifier la mise en œuvre numérique, on écrit les tenseurs d'ordre deux symétriques ε et σ sous la forme de vecteurs de 6 composantes. L'opérateur différences finies associé à la divergence peut s'écrire sous la forme de la matrice d'opérateurs :

$$\mathbb{D}' = \begin{bmatrix} D_1^- & 0 & 0 & 0 & D_3^+ & D_2^+ \\ 0 & D_2^- & 0 & D_3^+ & 0 & D_1^+ \\ 0 & 0 & D_3^- & D_2^+ & D_1^+ & 0 \end{bmatrix} \quad (1.48)$$

Enfin, la relation entre les composantes de déformation et les déplacements est donné par $\varepsilon = \mathbb{D} \cdot u$ avec $\mathbb{D}$ défini comme :

$$\mathbb{D} = \begin{bmatrix} D_1^+ & 0 & 0 \\ 0 & D_2^+ & 0 \\ 0 & 0 & D_3^+ \\ D_2^-/2 & D_1^-/2 & 0 \\ D_3^-/2 & 0 & D_1^-/2 \\ 0 & D_3^-/2 & D_2^-/2 \end{bmatrix} \quad (1.49)$$

Ainsi, après discrétisation, les équations (1.42) prennent la forme :

$$\dot{\varepsilon} = \mathbb{D} \cdot \mathbb{D}' \cdot \sigma(\varepsilon) + \mathbb{D} \cdot \zeta \quad (1.50)$$

La discrétisation en temps est effectuée avec un simple schéma d'Euler explicite :

$$\varepsilon^{t+dt} = \varepsilon^t + dt \left(\mathbb{D} \cdot \mathbb{D}' \cdot \sigma(\varepsilon^t) + \mathbb{D} \cdot \zeta^t \right) \quad (1.51)$$

où dt désigne le pas de temps. Nous montrons dans l'annexe A.2 que l'utilisation d'un tel schéma numérique permet de reproduire sans artefacts les champs de contrainte autour des dislocations, contrairement aux grilles différences finies "classiques" où tous les champs sont définis sur la même grille.

Un fois discrétisées, les équations sont implémentées dans un code différences finies utilisant la bibliothèque parallèle MPI. Ce choix est discuté dans l'annexe A.3 où les performances d'un code MPI sont comparées à une résolution numérique dans l'espace de Fourier, communément utilisée dans les approches champ de phase (Chen 98).

1.3 Validation du modèle

Cette section présente les éléments de validation qui assurent que ce modèle reproduit bien les propriétés essentielles des dislocations. On présentera tout d'abord les caractéristiques statiques des dislocations, en particulier leur structure de cœur et les champs de contraintes à longue distance. On verra ensuite le comportement dynamique du modèle mettant en évidence l'existence d'une contrainte de Peierls et d'un régime dynamique visqueux en accord avec la littérature (Kubin 13).

1.3.1 Structure de cœur

Le potentiel non linéaire fait apparaître un cœur de dislocation et évite la divergence des champs de contrainte de la dislocation de Volterra (Hirth 68). La figure 1.10 représente la structure de cœur d'une dislocation coin pour différentes valeurs du paramètre α . Pour $\alpha = 0$ (carrés rouges), la solution numérique peut être comparée à la solution analytique du MPN donnée par l'équation 1.12 (en pointillés). Le léger écart entre les deux solutions peut être attribué aux différences suivantes entre les deux approches :

- Le modèle de Peierls-Nabarro prend deux fois en compte l'énergie élastique de cisaillement. Cette contribution intervient en effet dans la réponse élastique du matériau et dans le potentiel non linéaire.

- Le MPN fait intervenir le potentiel non linéaire dans une plaquette d'épaisseur finie alors qu'il entre en jeu en volume dans tous les plans de glissement dans notre modèle. Ainsi, la structure de cœur peut "s'étaler" sur les plans adjacents au plan de glissement, ce qui n'est pas le cas pour le MPN.
- La résolution numérique de notre modèle s'effectue sur une grille discrète alors que la solution du MPN est continue.

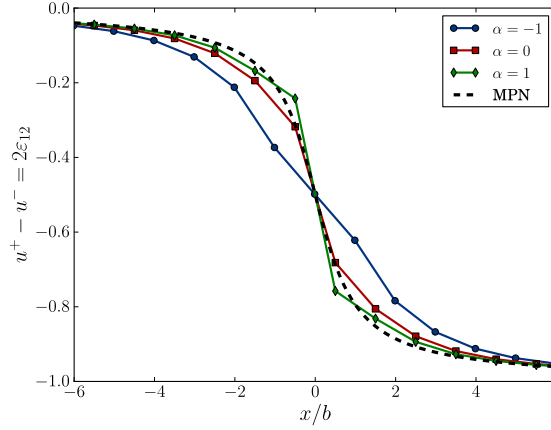


FIGURE 1.10 – Déformation $2\varepsilon_{12}$ le long du plan de glissement d'une dislocation coin représentant la structure de cœur de la dislocation pour différentes formes du potentiel périodique (figure 1.6) : $\alpha = -1$ (points bleus), $\alpha = 0$ (carrés rouges) et $\alpha = 1$ (losanges verts). Pour comparaison, la solution du MPN (équation 1.12) est présentée en pointillés.

Une comparaison plus quantitative entre le MPN et les solutions numériques consiste à comparer les largeurs caractéristiques des cœurs de dislocation. Pour ce faire, on applique la fonction tangente à la solution numérique puis on réalise une régression linéaire aux moindres carrés sur la courbe obtenue afin d'obtenir la largeur du cœur. Les résultats résumés dans le tableau 1.1 montrent que la structure de cœur de la dislocation est très proche de celle prédite par le MPN, et ce malgré les différences mentionnées plus haut.

$2\zeta/b$	Ce modèle	Modèle PN
coin	1.58	1.50
vis	1.02	1.00

TABLE 1.1 – largeur caractéristique du cœur normalisée par b pour $h = b$ et $\nu = 1/3$ dans le cas de dislocations coin et vis. Comparaison avec la solution analytique du modèle de Peierls-Nabarro.

Un des avantages de notre modèle réside dans la possibilité de modifier à volonté le potentiel non-linéaire. En particulier, le paramètre α permet de modifier l'allure du potentiel non linéaire et ainsi la structure de cœur de la dislocation. Les solutions numériques obtenues pour $\alpha = -1$ et $\alpha = 1$ montre que la structure de cœur est plus large pour $\alpha < 0$ et plus étroite pour $\alpha > 0$. On verra dans la partie 1.3.3 que cette modification de la structure de cœur influence considérablement la contrainte de Peierls de la dislocation.

1.3.2 Champs de contrainte à longue distance

Les champs de contrainte à longue distance représentent un élément de validation essentiel car ils assurent que les interactions élastiques entre les dislocations sont correctes. La figure 1.11 représente les champs de contrainte σ_{12} et σ_{11} générés par une dislocation coin. La solution analytique d'une dislocation de Volterra (Hirth 68) est représentée en

pointillés noirs. Pour un pas de grille $d = b$ (rouge), les champs de contraintes sont très proches de ceux donnés par la solution analytique et reproduisent une décroissance en $1/r$. Alors que la solution de Volterra est caractérisée par une divergence des contraintes au cœur de la dislocation, le potentiel non linéaire permet d'éviter cette divergence irréaliste et de donner une structure de cœur comme discuté dans le paragraphe précédent. On peut noter qu'une comparaison avec les solutions analytiques des contraintes du modèle de Peierls-Nabarro données dans (Hirth 68) donne un meilleur accord, en particulier au niveau du cœur de la dislocation.

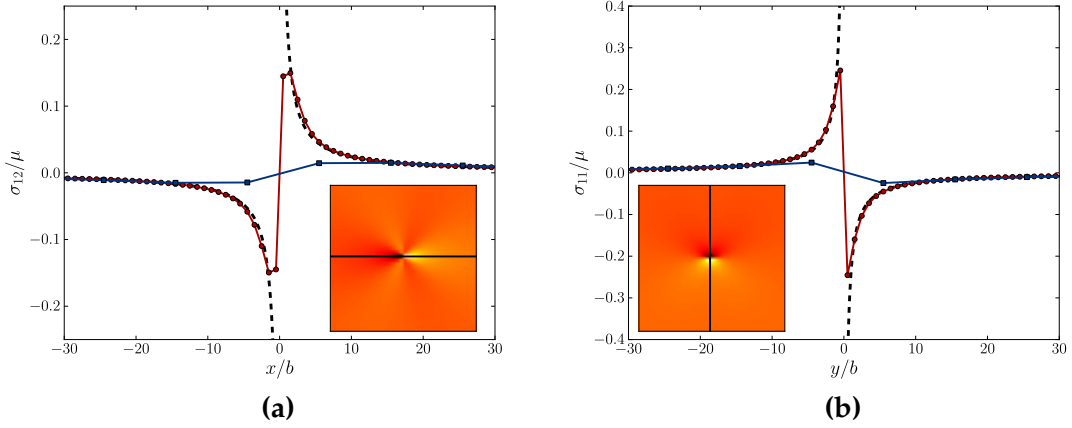


FIGURE 1.11 – Composantes σ_{12} (a) et σ_{11} (b) du tenseur des contraintes autour d'une dislocation coin avec $d = b$ (rouge) et $d = 10b$ (bleu). La solution analytique d'une dislocation de Volterra (Hirth 68) est représentée en pointillés.

Le choix du pas de grille influence les champs de contrainte proches du cœur de la dislocation. En effet, la figure 1.11 montre pour un pas de grille $d = 10b$ que les champs de contraintes au cœur de la dislocation sont réduits d'un facteur 10. On verra dans le paragraphe 1.3.3 que ceci a une influence sur la tension de ligne et donc sur la dynamique d'une dislocation courbée. Cependant, les contraintes à longue distance variant en $1/r$ sont retrouvées après quelques pas de grille. Les mêmes résultats sont obtenus pour une dislocation vis.

On peut noter que le paramètre α modifie légèrement les champs de contraintes au niveau du cœur de la dislocation mais n'influence pas les champs à longue distance.

1.3.3 Contrainte de Peierls

Du fait de la discrétisation du modèle, les dislocations sont "épinglées" par le réseau. La contrainte de Peierls est définie comme la contrainte minimale à appliquer pour mettre en mouvement une dislocation isolée. Pour la calculer, on crée un dipôle de dislocations séparées d'une distance $128b$ dans un système périodique de côté $256b \times 128b$. Cette configuration correspond à un réseau de dislocations équidistantes de signes opposés, où la contrainte de cisaillement agissant sur une dislocation et issue de l'ensemble du réseau est nulle. On résout numériquement l'équilibre élastique pour une contrainte appliquée³ que l'on augmente de manière quasistatique. La contrainte à partir de laquelle les dislocations du système se mettent en mouvement est la contrainte de Peierls.

3. Appliquer une contrainte de cisaillement extérieure revient à trouver la déformation moyenne $\bar{\epsilon}_{12}$ qui est solution de l'équation :

$$f(\bar{\epsilon}_{12}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p'(\epsilon_{12} + \bar{\epsilon}_{12}) - \sigma_{12}^a = 0$$

Pour $\alpha = 0$, la contrainte de Peierls ainsi déterminée peut être comparée à celle obtenue analytiquement avec le modèle de Peierls-Nabarro (voir tableau 1.2). Les contraintes de Peierls déterminées numériquement sont du même ordre de grandeur que l'application numérique de l'équation 1.20. Notre modèle est en effet proche du calcul où la somme porte sur les "liaisons" entre les plans supérieurs et inférieurs au plan de glissement (paragraphe 1.1.2). On constate cependant que les résultats numériques sont 3 fois plus faibles que les contraintes de Peierls de l'approche analytique. Ces désaccords peuvent être attribués aux différences mentionnées plus haut entre l'approche numérique et le MPN.

	MPN Eq. 1.17	MPN Eq. 1.20	Numérique
$\sigma_p^{coin} (10^{-3}\mu)$	0.242	13.5	4.73
$\sigma_p^{vis} (10^{-3}\mu)$	3.73	43.2	15.9

TABLE 1.2 – Contraintes de Peierls obtenues analytiquement par différentes méthodes de sommation (équations 1.17 et 1.20) pour $h = b$ et $\nu = 1/3$ et comparaison avec les résultats numériques issus du modèle.

La figure 1.12 montre l'évolution de la contrainte de Peierls en fonction du paramètre α intervenant dans l'expression du potentiel non-linéaire (équation 1.32) pour des dislocations coin (points rouges) et vis (carrés bleus). Pour $\alpha > 0$, la contrainte de Peierls croît de manière monotone avec α . On peut noter que quel que soit le caractère de la dislocation, la contrainte de Peierls tend vers une dépendance linéaire en α . Ce résultat peut être retrouvé dans la limite $\alpha \gg 1$ en utilisant un développement analytique valable dans la limite des cœurs de dislocation étroits (Joós 97). Les pentes différentes pour les dislocations coins et vis proviennent de l'influence du caractère de la dislocation sur la structure de cœur.

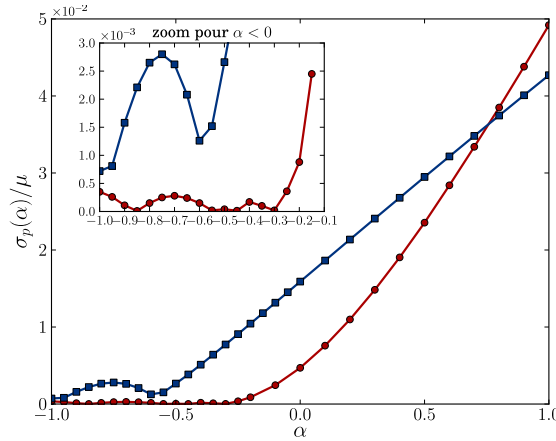


FIGURE 1.12 – Contrainte de Peierls pour une dislocation coin (points rouges) et vis (carrés bleus) en fonction du coefficient α . L'encart représente un zoom pour $\alpha < 0$.

Pour $\alpha < 0$, la contrainte de Peierls présente un caractère oscillant en fonction de α . Ceci peut être expliqué par des arguments proposés pour expliquer la contrainte de

où N est le nombre de points de la grille différences finies et $p'(x)$ la dérivée du potentiel non-linéaire. On peut montrer que la suite

$$\bar{\epsilon}_{12}^{k+1} = \bar{\epsilon}_{12}^k - \frac{f(\bar{\epsilon}_{12}^k)}{f'(\bar{\epsilon}_{12}^k)}$$

converge vers la solution désirée. Cette méthode de point fixe peut être généralisée pour une contrainte appliquée complexe impliquant différentes composantes de contraintes.

Peierls très faible des dislocations dissociées (Benoit 87). Supposons que la structure de cœur reste rigide et que la distance séparant les deux dislocations partielles est fixe. Si cette distance est un multiple de b , les deux partielles sont au fond de leur vallée de Peierls et montent les vallées de Peierls ensemble. La contrainte de Peierls est alors celle des dislocations partielles prises indépendamment. En revanche, si la distance s'écrit sous la forme $nb + b/2$, lorsqu'une partielle est au fond d'une vallée de Peierls, l'autre est au sommet de la colline et la contrainte de Peierls résultante est nulle. Bien évidemment, la distance séparant les partielles varie légèrement lorsque la dislocation se déplace sur le réseau mais ces arguments permettent de comprendre le caractère oscillant observé sur la figure 1.12 pour $\alpha < 0$. On peut noter que le paramètre α peut être choisi pour reproduire une contrainte de Peierls sur plus de trois ordres de grandeurs.

Il faut souligner que le pas de grille a une influence notable sur la contrainte de Peierls. En effet, étant donné que les contraintes maximales autour de la dislocation sont divisées par un facteur d/b , la contrainte de Peierls est également réduite de ce coefficient de proportionnalité.

Comportement dynamique

Le comportement dynamique des dislocations est un élément de validation essentiel afin de confirmer le choix des équations dynamiques 1.42. La figure 1.13 représente la vitesse de la dislocation en unités réduites en fonction de la contrainte appliquée. Au-delà de la contrainte de Peierls, la vitesse de la dislocation passe par un régime transitoire et atteint rapidement un régime linéaire qui s'étend sur une large plage de contraintes comme attendu par l'analyse du modèle présentée dans la section 1.2.2. Une simple régression linéaire permet de déterminer le coefficient de proportionnalité qui vaut 3.3 (unités réduites) quel que soit le caractère de la dislocation. De plus, ce coefficient n'est pas modifié par le choix du pas de discrétisation.

On peut noter que le coefficient η dont la valeur détermine la seule échelle de temps du modèle peut être choisi pour reproduire un coefficient de traînée de phonons et des vitesses de dislocations réalistes.

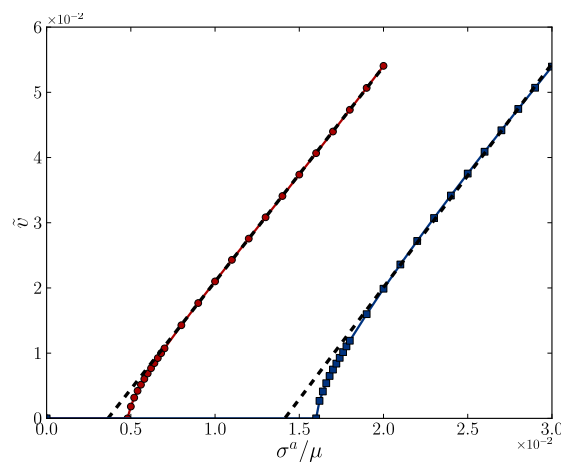


FIGURE 1.13 – Vitesse d'une dislocation (unités réduites) en fonction de la contrainte appliquée suivant son caractère coin (points rouges) ou vis (carrés bleus). Les droites obtenues par régression linéaire sont également représentées (pointillés noirs).

Annihilation de boucles de cisaillement

Le dernier test que nous avons réalisé pour valider notre modèle consiste à étudier la dynamique d'une boucle de dislocation s'annihilant sous l'effet de la tension de ligne.

Dans le cadre de l'élasticité linéaire, l'énergie d'une boucle de dislocation parfaite est finie seulement si on exclue une zone autour de la ligne de dislocation définie par un rayon de coupure r_0 . Lorsque le rayon R de la boucle supposée circulaire satisfait $R \gg r_0$, l'énergie de la boucle s'écrit comme (Hirth 68) :

$$W(R) = \frac{\mu b^2 R}{4} \frac{2-\nu}{1-\nu} \left(\ln \left(\frac{4R}{r_0} \right) - 2 \right) \quad (1.52)$$

Lorsque l'on change le rayon de la boucle d'une quantité dR , l'énergie augmente d'une quantité $dW = -\sigma b 2\pi R dR$ où σ est la contrainte locale de cisaillement subie par un brin de la dislocation et provenant du reste de la boucle. On considère que la taille de la boucle est suffisamment petite pour considérer que la contrainte subie par chaque brin est supérieure à la contrainte de Peierls. On peut donc écrire que la vitesse de chaque brin est reliée à la contrainte σ par une loi de vitesse du type $\dot{R} = v = (\sigma - \sigma_p) b / B$, où σ_p est la contrainte de Peierls considérée comme identique quel que soit le caractère de la dislocation. En réorganisant les différents termes, on en déduit $B \dot{S} = -\frac{dW}{dR} - 2\pi \sigma_p R$, où $S = \pi R^2$ est l'aire de la boucle. Finalement on obtient une loi d'évolution sur l'aire de la boucle donnée par :

$$\dot{S} = -\frac{\mu b^2}{4B} \frac{2-\nu}{1-\nu} \left(\ln \left(\frac{4\sqrt{S/\pi}}{r_0} \right) - 1 \right) - \frac{2\pi\sqrt{S/\pi}}{B} \sigma_p \quad (1.53)$$

Il suffit donc d'intégrer numériquement cette équation pour obtenir l'évolution de l'aire de la boucle en fonction du temps.

Afin de vérifier que notre modèle reproduit bien une telle dynamique, une boucle de rayon $R = 64b$ est introduite dans un système de dimensions $256 \times 256 \times 256 b^3$. La simulation est effectuée avec un pas de grille $d = b$. L'évolution de la surface de la boucle au cours du temps est représentée sur la figure 1.14. Le meilleur accord entre les solutions numérique (rouge) et analytique (noir) est obtenu en choisissant un rayon de coupure $r_0 = 0.93b$ et une contrainte de Peierls effective $\sigma_p = 1.25 \cdot 10^{-3} \mu$ pour la solution analytique. On peut tout d'abord noter que le rayon de coupure est très proche de la largeur du cœur de la dislocation (tableau 1.1), ce qui est bien cohérent. D'autre part, la contrainte de Peierls effective est plus faible que les contraintes de Peierls de dislocations rectilignes (tableau 1.2). Ceci peut être expliqué par le fait que la courbure de la dislocation peut avoir une influence sur la contrainte de Peierls.

Les légères différences entre les solutions numérique et analytique peuvent être expliquées par le fait que la boucle ne conserve pas sa forme circulaire au cours de la simulation (encart de la figure 1.14). Ceci est dû au fait que la tension de ligne est différente suivant le caractère de la ligne et est plus importante pour les dislocations vis dont l'énergie est plus élevée (Hirth 68).

Une simulation similaire a été effectuée pour un pas de discrétisation $d = 10b$. L'accord entre simulation et résultat analytique reste identique, seuls les paramètres r_0 et σ_p pour lesquels l'accord est optimal deviennent $r_0 = 9.3b$ et $\sigma_p = 1.25 \cdot 10^{-4} \mu$. Ainsi, le changement du pas de discrétisation revient à élargir le cœur de la dislocation et à réduire la contrainte de Peierls effective, ce qui a été caractérisé précédemment.

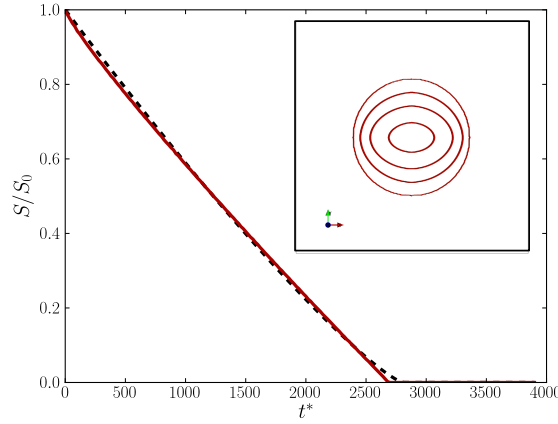


FIGURE 1.14 – Dynamique d’annihilation d’une boucle de cisaillement au cours du temps. La solution numérique (rouge) est comparée à la solution de l’équation 1.53 pour $r_0 = 0.93b$ et $\sigma_p = 1.25 \cdot 10^{-3}\mu$ (pointillés noirs). L’encart représente une iso-surface de l’énergie au niveau de la moitié de l’énergie maximale permettant de visualiser la boucle de dislocation à différents instants $t^* = 0, 800, 1600, 2400$.

1.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un modèle d’élasticité non linéaire prenant en compte la dynamique des dislocations. Il repose sur l’introduction d’un potentiel périodique directement dans l’écriture de l’énergie élastique et se distingue des approches champ de phase couramment utilisées (Rodney 01, Wang 01, Wang 10) par l’absence de champs supplémentaires et de termes de gradient. Ces termes de gradient présentent en effet une limitation de ces approches car ils ne permettent pas de représenter des cœurs de dislocation réalistes. Les mécanismes sensibles au comportement des cœurs sont donc fortement perturbés, en particulier le glissement dévié et la nucléation des dislocations.

Nous avons montré que ce modèle incorpore naturellement la description d’un cœur de dislocation caractérisé par une échelle de longueur. De même, les champs de contraintes à longue distance sont reproduits lorsque l’on s’éloigne du cœur de la dislocation. Les aspects dynamiques des dislocations sont également reproduits. La discrétisation du modèle sur une grille de différences finies permet d’introduire une contrainte de Peierls dont la valeur peut être aisément modifiée sur plusieurs ordres de grandeur au moyen du paramètre α introduit dans le potentiel périodique. Les équations dynamiques du modèle ont été choisies afin de reproduire une dynamique dissipative, observée expérimentalement sur une large plage de contraintes. Enfin, nous avons montré que le modèle reproduit fidèlement la dynamique d’annihilation d’une boucle de cisaillement. Lors de ces tests de validation, nous avons examiné avec attention l’influence du pas de la grille de discrétisation. On a montré que le choix de ce paramètre a peu d’influence sur les caractéristiques essentielles des dislocations, c’est-à-dire les champs de contraintes à longue distance et la dynamique dissipative. En revanche, il modifie la taille du cœur ainsi que la contrainte de Peierls.

La principale limitation du modèle dans son développement actuel est que seule la structure cubique simple est prise en compte. En effet, les systèmes de glissement d’un système cubique simple sont éloignés de ceux des métaux qui présentent des structures de type cubique centrée, cubique à faces centrées ou hexagonale compacte. Cependant, cette limitation n’est pas intrinsèque au modèle. La prise en compte de ces géométries nécessiterait un effort supplémentaire - mais pas insurmontable - de réflexion et de développement (une piste est présentée dans l’annexe A.1).

Les deux chapitres suivants présentent deux exemples d'application de ce modèle. Dans le chapitre 2, nous étudions les mécanismes de perte de cohérence des précipités dans les alliages microstructurés. Ensuite, nous examinons dans le chapitre 3 l'influence des dislocations sur les interfaces des précipités.

PERTE DE COHÉRENCE PAR NUCLÉATION DE DISLOCATIONS 2

A l'état solide, la coexistence de plusieurs phases fait apparaître des contraintes internes qui influencent les propriétés mécaniques et physiques des matériaux. La source de ces contraintes est attribuée aux différentes propriétés physiques des phases en présence (paramètres de maille, constantes élastiques, structure et orientation cristallines, ...).

Ces contraintes peuvent être modifiées par l'apparition de dislocations, c'est-à-dire par la relaxation plastique de la matrice ou du précipité. Cette relaxation plastique est désignée par le terme de perte de cohérence car les dislocations brisent la cohérence du réseau cristallin entre le précipité et la matrice. La perte de cohérence des précipités a une influence capitale sur les caractéristiques physique du matériau, provoquant souvent une chute des propriétés mécaniques (Tanaka 72). De plus, elle influence également l'évolution microstructurale en modifiant la vitesse de croissance des précipités (Sankaran 74, Iwamura 04). Il est donc primordial de comprendre les mécanismes conduisant à l'apparition de cette relaxation plastique pour permettre de mieux comprendre les éléments mis en jeu.

Ces mécanismes de perte de cohérence font intervenir la nucléation de dislocations ainsi que le glissement dévié de segments vis. De plus, la prise en compte des contraintes générées par le précipité est fondamentale pour étudier ce problème. Ainsi le modèle proposé dans le chapitre précédent qui prend en compte naturellement ces trois aspects apparaît comme un outil de choix pour l'étude de ces phénomènes.

Après une introduction des mécanismes de perte de cohérence et des différentes études qui y ont été consacrées, nous appliquerons le modèle présenté dans le chapitre précédent à l'étude de ces phénomènes.

2.1 Introduction

2.1.1 Observations expérimentales

L'apparition de dislocations à l'interface entre précipités de seconde phase et matrice est un phénomène courant qui a été observé dans de nombreux systèmes. Plusieurs mécanismes ont été proposés pour expliquer l'apparition de ces dislocations :

1. L'attraction de dislocations préexistantes dans la matrice (Weatherly 68b). Cette attraction se fait naturellement du fait des champs de contraintes provenant du désaccord paramétrique entre les phases. Elle prévaut dans les cas où la densité de dislocations est relativement élevée.
2. La nucléation et la croissance de dislocations par condensation de défauts ponctuels à l'intérieur du précipité (Baker 59, Weatherly 68b, Brown 70).

3. La nucléation de dislocations à l'interface précipité/matrice et l'émission éventuelle de boucles prismatiques (Ashby 69, Weatherly 68a, Brown 70). Ce mécanisme devient prédominant lorsque la densité de dislocations dans la matrice est faible et lorsque la cinétique de précipitation est suffisamment rapide pour inhiber le mécanisme précédent. Un désaccord paramétrique relativement important est par ailleurs nécessaire afin d'atteindre les contraintes auxquelles la nucléation est possible.

Dans la suite, on s'intéressera particulièrement aux systèmes où le mécanisme 3 est actif.

Eikum et al. (Eikum 64) ont étudié la nucléation de boucles de dislocations autour de précipités β de composition Mg_2Al_3 dans les alliages Al-Mg. Les auteurs montrent que l'apparition de précipités β s'accompagne de la nucléation de boucles prismatiques et d'hélices. Ils observent également l'apparition de dislocations via des sources de montée lorsque la concentration en lacunes est suffisamment élevée.

Le phénomène de perte de cohérence est également observé dans les alliages Al-Sc. Ainsi, au cours de la croissance des précipités d' Al_3Sc , leur perte de cohérence est généralement observée lorsque leur rayon atteint une valeur critique (Drits 84, Tsivoulas 06, Jones 03, Iwamura 04, Royset 05c). A titre d'illustration, la figure 2.1.a montre une observation au microscope électronique à transmission (MET) (Iwamura 04) d'un précipité d' Al_3Sc d'environ 200 nm de diamètre dont l'interface est décorée de boucles de dislocations qui relaxent les contraintes dues au désaccord paramétrique entre les phases. Les rayons critiques de perte de cohérence sont compris entre 15 nm et 40 nm. Royset et al. (Royset 05c) montrent que les différents rayons critiques mesurés dépendent fortement de la température du fait de l'influence de celle-ci sur le désaccord paramétrique entre les phases. Concernant le mécanisme à l'œuvre, la faible densité de dislocations dans la matrice permet d'écarter le processus 1. D'autre part, même si aucune boucle prismatique n'a été observée dans les diverses études expérimentales, le mécanisme 3 ne peut pas être écarté car les boucles prismatiques peuvent disparaître par absorption/émission de lacunes après leur création (Barnes 63). Aux températures élevées où sont étudiés ces alliages, le mécanisme 2 d'origine diffusive est également envisageable.

La situation est plus claire pour les précipités d'hydrure dans le niobium. Dans ce matériau de structure cubique centrée, les atomes d'hydrogène forment des précipités d'hydrure de composition NbH en plaquettes de structure orthorhombique alignés suivant les directions $[100]$ de la matrice (Rauch 65). La structure de ces précipités est souvent considérée comme cubique centrée légèrement déformée (Balasubramaniam 93). Comme la précipitation d'hydrures se fait à des températures modérées (Balasubramaniam 93), il est peu probable que le mécanisme 2 soit actif. Par ailleurs, la précipitation de cette phase s'accompagnant d'un changement de volume de 12%, les contraintes permettent d'atteindre des niveaux suffisants pour nucléer des dislocations aux interfaces. La figure 2.1 montre une micrographie MET (Makenas 80) d'un hydrure d'environ 500 nm de diamètre, dans le voisinage direct duquel on observe un enchevêtrement complexe de dislocations. Plus loin de l'interface, des boucles prismatiques circulaires apparaissent très nettement et confirment la prédominance du mécanisme 3.

On peut également citer le cas des hydrures dans le zirconium qui apparaissent sous la forme d'aiguilles allongées. Pour ce système, les observations expérimentales indiquent que la nucléation de boucles de cisaillement contribue aux différentes étapes de formation de cette phase (Carpenter 73, Carpenter 78a). Nous discuterons plus en détail de ce système à la fin du chapitre 3.

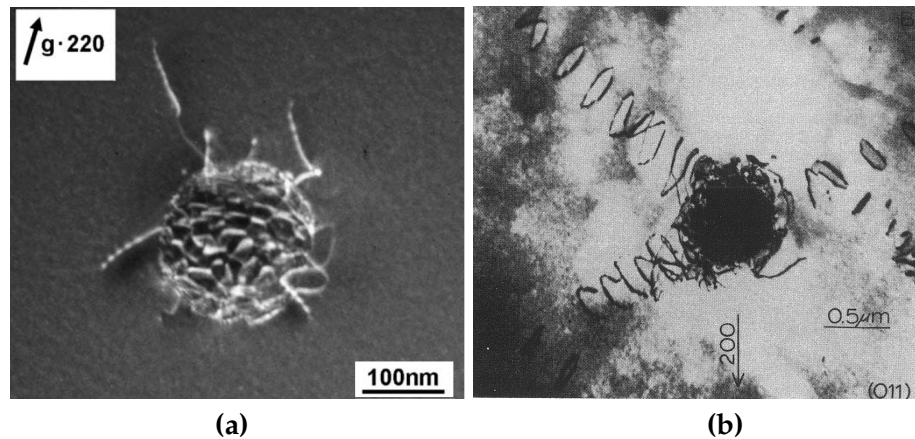


FIGURE 2.1 – Perte de cohérence par apparition de dislocations (a) à l'interface d'un précipité Al_3Sc (Iwamura 04), (b) par émission de boucle prismatiques autour d'un précipité d'hydrure dans du niobium (Makenas 80).

On peut noter que l'émission de boucles prismatiques est également observée pour d'autres types de situations telles qu'autour d'oxydes dans des semi-conducteurs (Tan 76) ou dans le voisinage des renforts dans les composites à matrice métalliques (Dunand 91a, Dunand 91b). Pour ces deux systèmes, la différence de coefficients de dilatation thermique entre la matrice et l'inclusion conduit à de fortes contraintes d'interface après un traitement en température. Dans le cas des semi-conducteurs, ces boucles prismatiques peuvent dégrader les performances optique et électronique du matériau. Pour les composites à matrice métallique, ces boucles prismatiques ont un impact significatif sur la densité de dislocations et peuvent conduire à un durcissement du matériau (Arsenault 86).

2.1.2 Etudes théoriques

Les premiers modèles proposés pour étudier la perte de cohérence par nucléation de boucles de dislocations sont basés sur des solutions analytiques reposant sur des configurations de dislocations simples (Weatherly 68a, Brown 68, Ashby 69). Ces approches s'attachent principalement à définir un critère de perte de cohérence dépendant de la taille et du désaccord paramétrique du précipité.

On peut distinguer les approches basées sur des critères énergétiques de celles reposant sur des critères en contrainte. Les premières reposent sur une comparaison de l'énergie entre une configuration cohérente et une configuration où une boucle de dislocation a été formée (Brown 68, Brown 70). Les critères en contrainte (Weatherly 68a) supposent que la perte de cohérence n'a lieu que lorsque la contrainte à l'interface précipité/matrice est suffisamment élevée pour conduire à la nucléation d'une dislocation. Conformément à la solution d'Eshelby (Eshelby 57), ces critères sont indépendants de la taille du précipité. Néanmoins, les observations expérimentales (Ashby 69, Brown 70) montrent que la perte de cohérence dépend de la taille du précipité mais que les critères énergétiques sous-estiment souvent le rayon critique à partir duquel la perte de cohérence apparaît.

Afin d'expliquer l'observation de boucles prismatiques émises lors du processus de perte de cohérence, Ashby et Johnson (Ashby 68) proposent un mécanisme de formation de ces boucles. Ce processus est représenté sur la figure 2.2. Premièrement, une boucle de cisaillement est nucléée à l'interface entre le précipité et la matrice (2.2.a), s'étend dans son plan de glissement jusqu'à une taille critique où les brins vis changent de plan

de glissement (2.2.b) et glissent vers le bas du précipité (2.2.c). Enfin, les brins vis de la boucle se rejoignent pour former une boucle prismatique complète (2.2.d). Pour assurer la clarté du schéma, la boucle prismatique restant à l'interface précipité/matrice n'est pas représentée. La boucle prismatique complémentaire est repoussée par le champ de contrainte du précipité. Ce mécanisme permet d'expliquer la formation de boucles prismatiques mais repose sur une séquence d'événements qui est davantage supposée que démontrée.

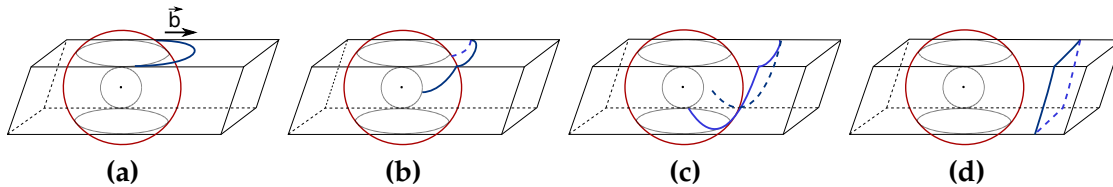


FIGURE 2.2 – Processus de perte de cohérence proposé par Ashby et Jonshon (Ashby 69). Explications dans le texte.

Ce processus est étendu au cas de précipités en forme d'aiguilles par Carpenter et al. (Carpenter 73) pour expliquer les structures de dislocations observées autour de précipités d'hydrure dans des alliages de zirconium. Les auteurs notent que le glissement dévié des brins vis peut être inhibé par la dissociation des dislocations, ce qui rend plus difficile la formation de boucles prismatiques.

Plus récemment, ces mécanismes ont été abordés par Tsuru et al. (Tsuru 07) qui utilisent la statique moléculaire pour étudier la nucléation de dislocations autour d'une inclusion indéformable dans une matrice d'aluminium soumise à une pression externe. Les auteurs montrent qu'au delà d'une pression critique, la perte de cohérence s'effectue par émission de boucles prismatiques autour de l'inclusion. En revanche, le processus d'Ashby et Johnson n'est pas directement obtenu et les boucles prismatiques sont formées à partir de 4 boucles de cisaillement possédant le même vecteur de Burgers et glissant sur des plans différents de type [111].

La Dynamique des Dislocations est une technique permettant d'étudier l'évolution des dislocations à des échelles d'espace et de temps mésoscopiques. Shin et al. (Shin 01) étudient l'équilibre d'une boucle de cisaillement autour d'un précipité cubique ainsi que l'équilibre d'un empilement de boucles prismatiques autour d'une inclusion. Cependant, ces travaux ne s'attachent pas aux mécanismes de nucléation. On peut toutefois noter que les processus de nucléation peuvent être pris en compte en incorporant un critère de nucléation (Dayeh 13, Grydlik 12).

Jesser (Jesser 69) propose un critère de perte de cohérence au moyen d'une approche plus mésoscopique. L'énergie d'un précipité se compose d'un terme élastique (Eshelby 57) et d'un terme de surface. Lors de la perte de cohérence, cette énergie surfacique s'écrit comme la somme d'une énergie chimique et de l'énergie d'un réseau de dislocations apparaissant à l'interface. L'énergie du réseau de dislocations est estimée grâce à un simple modèle 1D. L'auteur montre que le critère de perte de cohérence obtenu par la comparaison de ces contributions énergétiques est en bon accord avec les observations expérimentales. Cette approche a été utilisée pour expliquer le rôle de la perte de cohérence sur la cinétique de mûrissement d'Ostwald d'une population de précipités Al_3Sc (Iwamura 04). L'apparition d'un réseau de dislocations augmente l'énergie d'interface effective, ce qui a tendance à accélérer la cinétique de mûrissement. Les auteurs de (Iwamura 04) notent un bon accord entre les résultats expérimentaux et l'approche théorique.

Dans (Johnson 83), les auteurs notent que les dislocations émises sur différents plans

de glissement interagissent et peuvent donner naissance à des enchevêtrements à une faible distance du précipité. Les auteurs proposent un modèle analytique qui prend en compte la formation de tels enchevêtrements et leur influence sur la nucléation de boucles prismatiques additionnelles. Cette approche permet de déduire la taille de la zone plastique autour des précipités en fonction du rayon du précipité et de son désaccord paramétrique. Cette approche constitue un lien entre une description de la relaxation plastique autour des précipités par un ensemble de dislocations interagissant entre elles et des approches plus macroscopiques de plasticité continue. Une telle approche est proposée dans (Lee 80) où les auteurs traitent analytiquement le cas d'une inclusion sphérique dans une matrice elasto-plastique. Le comportement plastique de la matrice est supposé parfait (pas de durcissement) et est contrôlé par un critère de plasticité sur la contrainte de Von Mises. Les auteurs soulignent que le critère de plasticité doit être choisi en fonction de la taille du précipité. En effet, pour une inclusion dont la taille est de l'ordre du micron, on peut supposer que la densité de dislocations dans le voisinage du précipité est suffisante pour que le critère de plasticité se rapproche de celui du comportement macroscopique du matériau. Ceci correspond au cas où les précipités attirent des dislocations de la matrice à leur interface. Au contraire, pour des petits précipités nanométriques, il est raisonnable de considérer qu'aucune dislocation n'est présente proche du précipité et la plastification de la matrice se fait par nucléation de boucles de dislocations à l'interface. Dans ce cas, un critère de plastification plus élevé tenant compte de la nucléation de dislocations doit être considéré. Cette approche a été généralisée pour un modèle de plasticité tenant compte de l'écrouissage (Earmme 81).

Une autre voie a été proposée par Appolaire et al. (Appolaire 10) qui développent une approche mésoscopique reposant sur des champs continus décrivant la perte de cohérence des interfaces. Un nouveau champ défini à l'interface précipité/matrice représente le degré de perte de cohérence du précipité. L'apparition de ce champ permet de relaxer les contraintes de cisaillement tangentiels à la surface du précipité. Toutefois, la relaxation des efforts tangentiels est très éloignée des mécanismes observés de nucléation de boucles prismatiques ou d'enchevêtrement de dislocations.

On peut également citer les travaux de Shi et al. (Shi 12) qui décrivent l'interface d'un précipité incohérent grâce à une structure de dislocations et de marches. Cette approche consiste à déterminer l'état de cohérence d'un précipité en minimisant l'énergie du système vis-à-vis de la structure de défauts d'interface. Bien que ce formalisme ait montré son efficacité à décrire les morphologies des précipités, il ne s'attache pas à la description des mécanismes qui génèrent *dynamiquement* la perte de cohérence.

Une approche similaire à celle proposée dans le chapitre 1 a été appliquée à l'étude des interactions entre dislocations et précipités (Minami 05, Minami 07). Bien qu'il soit fait mention de la nucléation de dislocations à l'interface entre précipité et matrice, les mécanismes de perte de cohérence ne sont pas analysés en détail.

Finalement, il apparaît que la perte de cohérence par nucléation de dislocations a été peu abordée dans la littérature. Les approches de type statique moléculaire ont permis de mettre en perspective le processus d'Ashby et Johnson mais leur application reste limitée car les échelles d'espace accessibles avec ce type de méthode sont nécessairement restreintes. Les techniques de type dynamique des dislocations permettent d'explorer des échelles plus importantes mais aucune étude ne s'attache à étudier les mécanismes de perte de cohérence par nucléation de dislocations. Enfin, les approches mésoscopiques proposées jusqu'ici ne permettent pas d'étudier les mécanismes tels que le processus d'Ashby et Johnson.

2.2 Formation de boucles prismatique - Processus d'Ashby et Johnson

Le modèle d'élasticité non-linéaire proposé dans le chapitre 1 paraît particulièrement adapté à l'étude des mécanismes de perte de cohérence. En effet, il prend naturellement en compte la nucléation des dislocations. De plus, le glissement dévié qui est un élément important de ces mécanismes est décrit de manière naturelle contrairement aux modèles de champ de phase de dislocations "classiques" qui rendent difficile une reproduction réaliste de ce mécanisme. Enfin, cette approche permet d'explorer des échelles d'espace plus importantes que les simulations atomiques.

Dans le chapitre précédent, nous avons vu qu'un choix naturel pour le pas de discrétisation était le vecteur de Burgers b . Même si le choix d'un pas de grille plus grand ne permet pas d'obtenir les bonnes contraintes à proximité du cœur, les champs de contrainte à longue distance ainsi que la dynamique des dislocations restent corrects. L'étude des mécanismes de perte de cohérence ne nécessite pas de prendre en compte tous les détails du cœur de la dislocations. Afin d'explorer facilement des échelles d'espace caractéristiques d'une microstructure réaliste, nous avons fait le choix d'un pas de discrétisation $d = 10b$. Pour ce choix, la contrainte de nucléation est de l'ordre de $10^{-2}\mu$, une valeur réaliste lorsque le processus de nucléation est thermiquement activé. On peut toutefois noter que des simulations effectuées avec un pas de discrétisation $d = b$ conduisent aux mêmes mécanismes.

Un précipité de rayon $R = 200b$ caractérisé par une déformation libre de dilatation volumique $\epsilon^0 = 1.75\%$ est considéré dans un système de $1280 \times 1280 \times 1280 b^3$. Le précipité et la matrice sont considérés comme isotropes avec un coefficient de Poisson $\nu = 1/3$ et possèdent les mêmes constantes élastiques.

Afin d'éviter la nucléation spontanée sur les positions symétriques, la déformation libre est choisie juste en dessous de la valeur critique où la nucléation apparaît. De plus, pour éviter un impact trop important de la grille de discrétisation sur la nucléation des dislocations, on introduit une interface précipité/matrice diffuse sur une distance $40b$. On peut noter que des simulations effectuées avec une interface abrupte conduisent aux mêmes mécanismes. Un faible bruit de Langevin introduit dans les équations dynamiques permet de désynchroniser la nucléation symétrique de dislocations en différents points de l'interface. Dès la nucléation d'une boucle, le bruit de Langevin est coupé de telle sorte que son influence sur la suite de la dynamique soit réduite à un minimum.

La figure 2.3 représente quatre clichés de la simulation à des temps différents. La surface du précipité est représentée en orange. Afin de visualiser les dislocations, on calcule d'abord la différence entre l'énergie élastique locale de la configuration courante et d'une configuration où aucune dislocation n'a été nucléée. Une iso-surface de cette différence permet d'obtenir une représentation des boucles de dislocations.

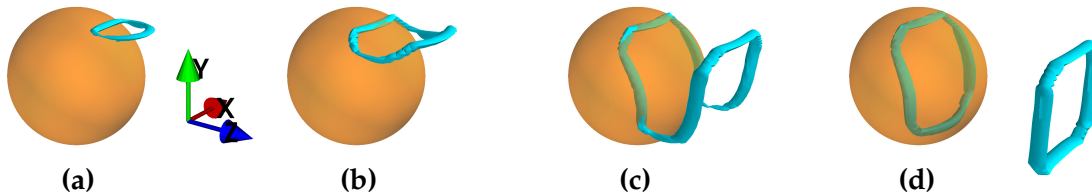


FIGURE 2.3 – Processus de perte de cohérence issu de la simulation numérique (instants $t^* = 20, 60, 140$ et 800 après nucléation)

Malgré la différence entre les systèmes de glissement simulés de type $(100)[001]$ et les systèmes de glissement d'une symétrie CFC $(111)[110]$ considérés dans le processus

d'Ashby et Johnson, le mécanisme obtenu numériquement est très comparable aux différentes étapes du schéma de la figure 2.2. La nucléation de la boucle de cisaillement a lieu dans la région où les contraintes de cisaillement sont les plus importantes. La boucle s'étend jusqu'à une taille critique où ses brins vis entament le glissement dévié. Finalement, une boucle prismatique d'interstitiels est formée et est repoussée par le champ de contrainte issu du précipité. La boucle prismatique complémentaire reste à l'interface entre précipité et matrice et relaxe les contraintes générées par la dilatation volumique de l'inclusion.

Néanmoins, outre les différents systèmes de glissement, le processus obtenu numériquement présente plusieurs différences avec le schéma d'Ashby et Johnson. Ces différences sont mises en évidence sur la figure 2.4 qui représente une vue de face de la boucle prismatique émise (projetée dans le plan (x, y)). On note les différences suivantes :

- À cause de l'aspect diffus de l'interface, les champs de contraintes et de déformations diffèrent de ceux prédits par la solution d'Eshelby (Eshelby 57), utilisée dans l'approche d'Ashby et Johnson. La région où les contraintes de cisaillement sont maximales est située en avant de l'interface, à une altitude $y = 0.825 R$, légèrement supérieure à l'altitude $y = R/\sqrt{2}$ prédite par la solution d'Eshelby.
- La boucle prismatique présente des coins arrondis, contrairement aux boucles parallélépipédiques prévues par le processus d'Ashby et Johnson (figure 2.2). Le début du glissement dévié des segments vis s'effectue par des événements successifs de glissement dans des directions perpendiculaires alternées. Cette alternance est due à la complexité du champ de contrainte subi par la boucle de dislocation qui incorpore le champ de contrainte issu du précipité et de l'ensemble de la boucle. Ce glissement dévié "en escalier", lissé par la méthode de représentation explique la forme arrondie de la boucle de dislocation émise. On peut remarquer que cela s'approche des boucles observées expérimentalement (voir figure 2.1) bien qu'il soit possible que celles-ci aient évolué par montée après leur émission.
- La boucle prismatique n'est pas centrée par rapport au précipité sphérique. Ceci est dû encore une fois à la prise en compte du champ de contrainte produit par le reste de la boucle de dislocation lors du deuxième événement de glissement dévié (en bas du précipité) qui a lieu dans un plan d'altitude $y = -0.575 R$.

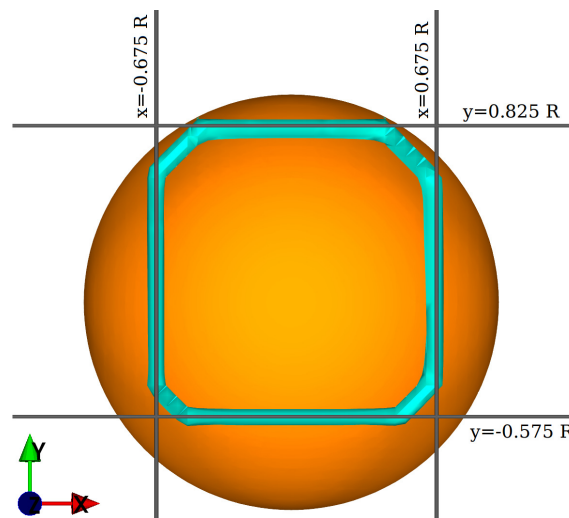


FIGURE 2.4 – Vue de la boucle émise projetée dans le plan (x, y) . Les lignes noires indiquent les plans de glissement principaux de la boucle prismatique.

2.3 Processus plus complexes

L'avantage de notre modèle est qu'il permet l'investigation de mécanismes plus complexes. En particulier, pour un précipité plus grand de rayon $R = 320b$, le mécanisme obtenu est différent.

Lorsqu'on augmente la taille du précipité en conservant la même largeur d'interface, l'influence de la diffusivité de l'interface se fait moins sentir et les champs de contraintes à l'interface précipité/matrice sont plus importants. Ainsi, le misfit critique pour lequel on observe la perte de cohérence spontanée est réduit. Pour $R = 320b$, la déformation libre volumique critique est de 1.56%. Comme précédemment, on choisit une valeur de $\epsilon^0 = 1.55\%$ juste en dessous à la valeur critique afin de déclencher la perte de cohérence par le bruit de Langevin. Pour réduire les effets de bords, la taille du système est $2560 \times 2560 \times 2560 b^3$.

La figure 2.5 montre les différentes étapes de la simulation. Tout comme pour le processus d'Ashby-Johnson, la perte de cohérence est amorcée par la nucléation d'une boucle de cisaillement. Le mécanisme de glissement dévié de cette boucle de cisaillement est cependant plus complexe. Les parties vis de la boucle de dislocation s'enroulent sur elles-mêmes (Fig. 2.5.b) pour former des petites boucles de cisaillement supplémentaires (Fig. 2.5.c). Ces boucles s'étendent sous l'effet de la contrainte et fusionnent pour former une boucle de cisaillement secondaire (Fig. 2.5.d). Cette boucle secondaire se recombine avec la boucle primaire à la surface du précipité (Fig. 2.5.e). Lorsque les parties vis de la boucle secondaire entament leur glissement dévié, la boucle primaire a déjà atteint la partie inférieure du précipité et ses brins vis se rejoignent de manière plus complexe que pour le processus de Ashby et Johnson (Fig. 2.5.e). En effet, le glissement dévié de la boucle primaire conduit à une protubérance qui remonte à la rencontre de la boucle secondaire (Fig. 2.5.e et Fig. 2.5.f). Lorsque la boucle secondaire rencontre cette partie protubérante, chacune des boucles (primaire et secondaire) se sépare en une boucle émise et une boucle complémentaire qui reste à l'interface précipité/matrice (Fig. 2.5.g). On peut remarquer que les plans de glissement des différentes boucles de dislocations ne sont pas identiques et que les boucles complémentaires annotées 1 et 3 sur la figure 2.5.h sont plus grandes que les boucles 2 et 4.

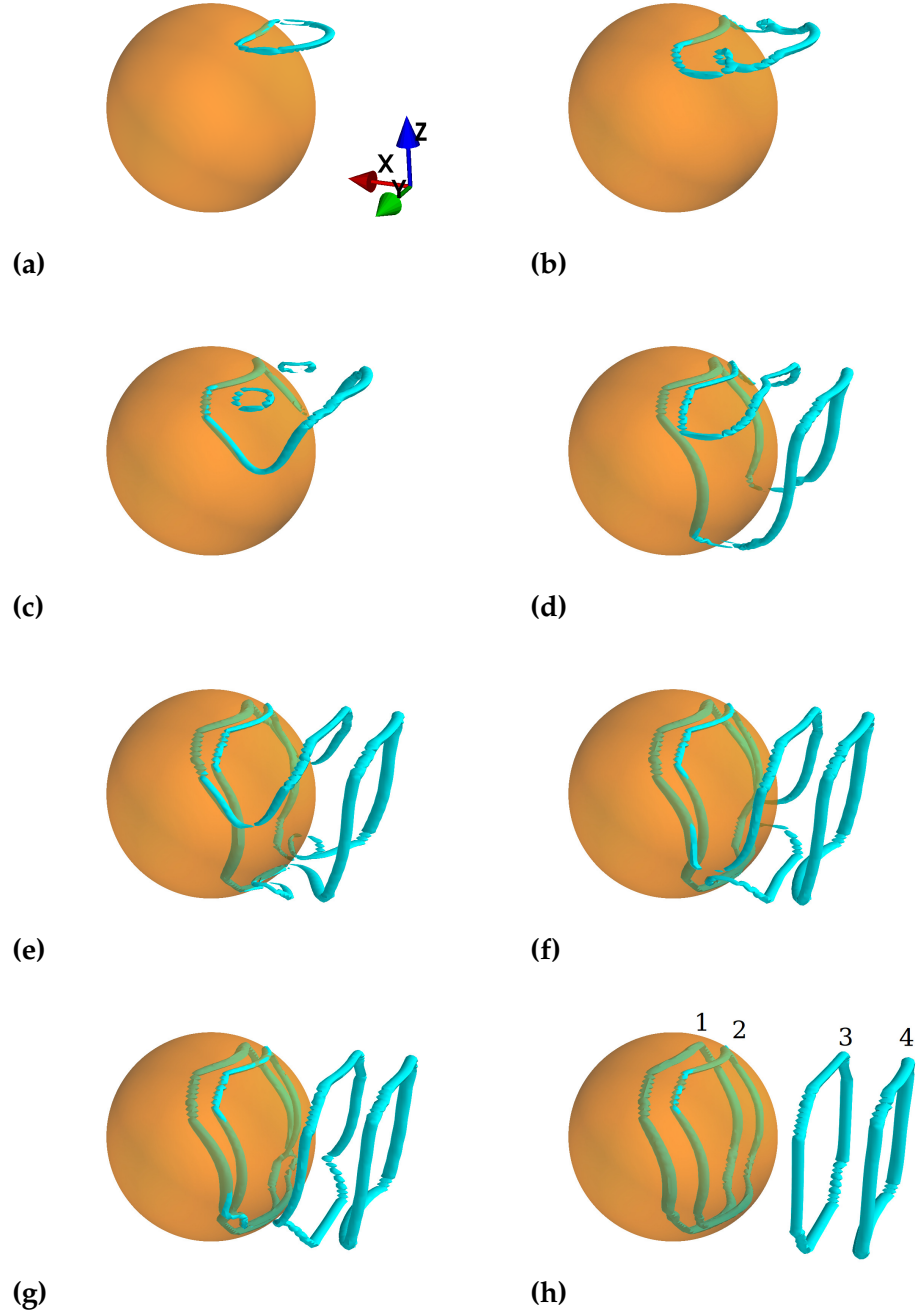


FIGURE 2.5 – Processus d'émission de deux boucles prismatiques pour un précipité $R = 320b$ avec $\varepsilon^0 = 1.55\%$. Clichés aux instants $t^* = 16, 40, 64, 104, 136, 160, 176, 200$ après nucléation.

Une autre morphologie également observée lors de nos simulations est la formation d'hélices. Cette situation est rencontrée lorsque la déformation libre est suffisamment importante pour conduire à l'émission de plusieurs boucles prismatiques dans chaque direction. On considère par exemple un précipité de rayon $R = 320b$ dans un système $2560 \times 2560 \times 2560 b^3$ possédant une déformation libre volumique $\varepsilon^0 = 2.5\%$. La figure 2.6.a montre une représentation de la simulation avec une courte hélice composée de deux boucles prismatiques liées entre elles (les autres boucles prismatiques émises ont été retirées de la représentation). Cette configuration est très proche de ce qui est observé expérimentalement autour d'hydrures dans le niobium comme on peut le voir sur la micrographie de la figure 2.6b issue de (Makenas 80). Le détail des simulations montre que de telles configurations sont dues à une asymétrie au cours du processus de nucléation qui a pour origine le bruit de Langevin ou l'asymétrie de la grille de discrétisation. On montre ainsi que dans ce cas, la formation d'hélices n'est pas postérieure à la nucléation de la boucle contrairement aux situations où les hélices sont issues de l'interaction entre des boucles prismatiques et une dislocation vis.

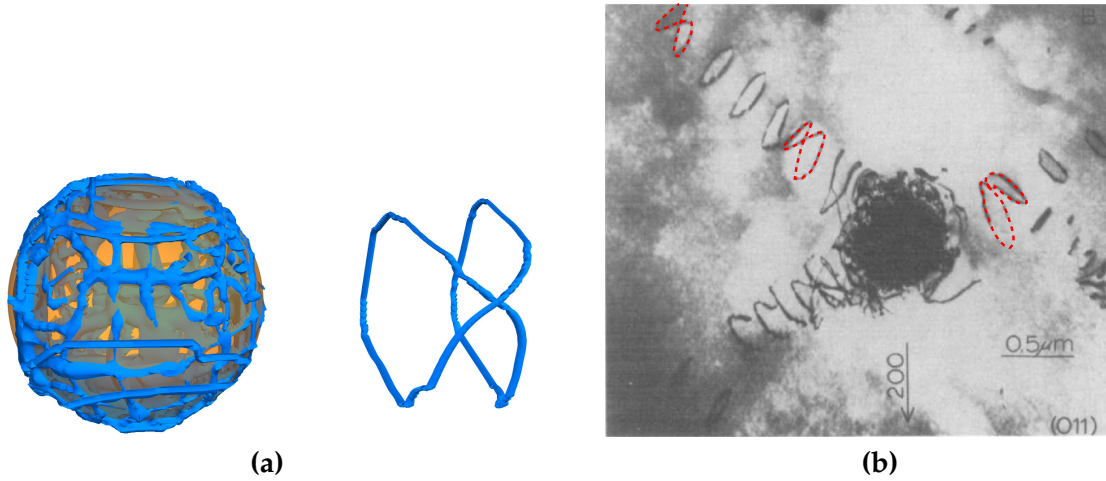


FIGURE 2.6 – (a) Deux boucles prismatiques liées entre elles formant une courte hélice ($R = 360b$ and $\varepsilon^0 = 2.5\%$); (b) Micrographie MET d'un hydrure de niobium après nucléation de dislocations (Makenas 80).

2.4 Génération de trains de boucles prismatiques

Lorsque la déformation libre est supérieure à une valeur critique, il y a nucléation de boucles de cisaillement de manière symétrique sur les différents sites de nucléation disponibles. Ces boucles de cisaillement s'étendent dans leur plan de glissement jusqu'à une taille critique où elles se rejoignent. Les boucles fusionnent et forment des boucles prismatiques complètes qui sont émises du précipité. Ce mécanisme est très comparable à ce qui est observé dans des simulations atomiques (Tsuru 07).

Si le champ de contrainte n'est pas suffisamment relaxé par la nucléation d'une première série de boucles prismatiques, d'autres boucles sont formées successivement. La figure 2.7.a montre une simulation effectuée pour un précipité de rayon $R = 200b$ et de déformation libre $\varepsilon^0 = 2.5\%$ où l'on constate la nucléation de deux séries de boucles prismatiques. On peut noter que les boucles prismatiques ne sont pas de la même taille. En effet, après la première nucléation, les dislocations d'interface relaxent les contraintes de misfit, ce qui inhibe des nucléations successives dans le même plan de glissement. Par exemple, sur la figure 2.7.a, les boucles nucléées en premier sont plus grandes que les

boucles secondaires. Ceci dépend fortement de la configuration et on ne peut pas tirer de règle générale sur la taille des boucles en fonction de leur position dans la séquence de nucléation.

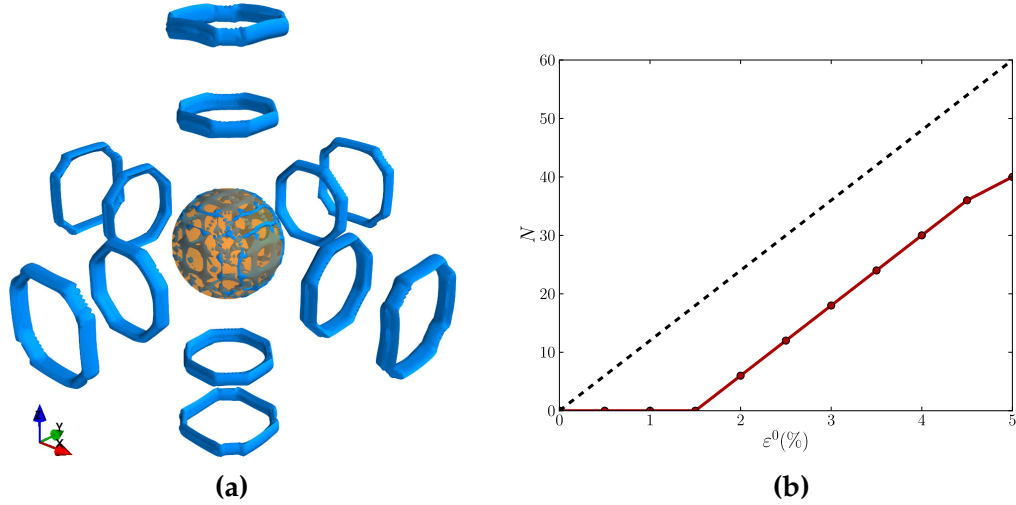


FIGURE 2.7 – (a) Exemple de nucléations successives de boucles prismatiques ($R = 200b$, $\varepsilon^0 = 2.5\%$). (b) Nombre de dislocations émises en fonction de la déformation libre pour un précipité de rayon $R = 200b$ (rouge) et estimation issue de l'équation 2.1 (pointillés noirs).

Le nombre N de boucles prismatiques émises peut être estimé en supposant que les dislocations laissées à l'interface précipité/matrice relaxent entièrement la déformation libre dans les directions d'émission (Dunand 91b). Pour un précipité sphérique de rayon R , de déformation libre de dilatation ε^0 et conduisant à l'émission de boucles prismatiques dans trois directions orthogonales, on a :

$$N = 3 \times \frac{2R\varepsilon^0}{b} \quad (2.1)$$

Même si cette estimation grossière ne tient pas compte des interactions élastiques et néglige l'effet de seuil pour la nucléation, elle est souvent utilisée pour obtenir une estimation du nombre de boucles émises et de la taille de la zone plastique (par exemple (Dunand 91c, Xin 97)).

Afin de vérifier l'augmentation linéaire de N avec ε^0 , nous avons effectué une série de simulations avec un précipité de rayon $R = 200b$ en faisant varier la déformation libre. La taille de la simulation est prise très large $2560 \times 2560 \times 2560b^3$ de telle sorte que les interactions avec les images périodiques sont réduites au minimum.

La figure 2.7.b indique que N croît linéairement avec la déformation libre ε^0 avec une pente en accord avec l'estimation 2.1. La différence entre les deux droites est due à la nucléation : en dessous d'un seuil $\varepsilon^0 = 1.5\%$, les contraintes à l'interface précipité/matrice ne sont pas assez importantes pour provoquer la nucléation de dislocations. Au delà de 36 boucles ($\varepsilon^0 = 4.5\%$), les contraintes issues des images périodiques deviennent importantes et inhibent la nucléation de dislocations supplémentaires. En conséquence, N dévie de son comportement linéaire.

On peut noter que, dans nos simulations, le nombre de boucles prismatiques varie également en fonction du rayon du précipité, comme attendu par l'équation 2.1. Toutefois, cette dépendance est plus difficile à examiner du fait des dimensions réduites des systèmes accessibles.

2.5 Conclusion

La perte de cohérence par nucléation de dislocations a été étudiée avec le modèle d'élasticité périodique présenté dans le chapitre 1. On a pu montrer que le mécanisme proposé par Ashby et Johnson (Ashby 69) constitue un processus réaliste. Les simulations numériques montrent également des processus de perte de cohérence plus complexes tels que l'apparition de deux boucles prismatiques issues d'une seule boucle de cisaillement ainsi que la nucléation d'hélices. Nous avons également montré que le nombre de boucles prismatiques répond à certaines tendances en fonction de la déformation libre du précipité.

On peut cependant noter que le modèle proposé ici manque de réalisme à bien des égards. Tout d'abord, les systèmes de glissement des simulations numériques sont de type (100)[001], éloignés des systèmes de glissement des structures cubiques faces centrées (CFC), cubiques centrées (CC) ou hexagonales compactes (HCP). Ainsi, il serait abusif d'attribuer les mécanismes mis en évidence dans ce chapitre à d'autres symétries cristallines. D'autre part, le glissement dévié des dislocations vis est très éloigné de ce qui se passe dans d'autres structures cristallines. Par exemple pour une structure CFC, les dislocations vis se dissocient suivant la réaction

$$\frac{a}{2}[1\bar{1}0] \rightarrow \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}] + \text{ISF} + \frac{a}{6}[1\bar{2}1] \quad (2.2)$$

où ISF¹ désigne une faute d'empilement. Les deux partielles possèdent alors une composante coin qui empêche un mécanisme de glissement dévié indépendant. Le glissement dévié est possible lorsque les partielles se rejoignent puis se recombinent (Caillard 03). Ces processus thermiquement activés ne sont pas pris en compte dans le modèle proposé dans lequel les dislocations vis glissent dans la direction de plus forte contrainte. Ce glissement dévié "facile" reste donc éloigné des mécanismes rencontrés dans les autres structures cristallines.

Toutefois, nous pensons qu'il est possible de généraliser le modèle à une structure cristalline quelconque. On peut adopter une approche *bottom-up* qui consiste à prendre comme fonction périodiques des γ -surfaces calculées par des méthodes *ab initio*. Ceci permettrait d'obtenir une structure de cœur et une dissociation réalistes pour rendre compte des mécanismes de glissement dévié de manière naturelle.

Un des avantages du modèle d'élasticité périodique consiste en sa formulation variationnelle. On peut ainsi inclure des termes additionnels dans l'énergie dépendant d'autres degrés de liberté, ce qui permet de modéliser de manière cohérente le couplage entre plusieurs mécanismes d'origines différentes. Par exemple, en se basant sur les travaux de thèse d'Umut Salman (Salman 09), on peut coupler la dynamique des dislocations avec la dynamique d'une transformation de phase martensitique. Une autre possibilité consiste à incorporer dans ce modèle les changements de phase diffusifs et ainsi modéliser les interactions entre dislocations et évolutions microstructurales. En particulier, lors de la perte de cohérence, les boucles de dislocations restant à l'interface précipité/matrice peuvent avoir une influence sur la morphologie du précipité ainsi que sur la croissance de celui-ci comme c'est le cas pour les précipités Al₃Sc dans les alliages d'aluminium (Iwamura 04). Ces aspects font l'objet du chapitre suivant.

1. ISF : Intrinsic Stacking Fault

INTERACTIONS DISLOCATIONS/MICROSTRUCTURE EN ÉVOLUTION DANS L'ALLIAGE AL-Sc

3

Dans le chapitre précédent, nous avons utilisé le modèle proposé dans le chapitre 1 pour étudier les mécanismes de perte de cohérence. Les dislocations nucléées à l'interface du précipité relaxent une partie des contraintes issues du désaccord paramétrique entre le précipité et la matrice. Les champs de contraintes issus de ces dislocations peuvent à leur tour affecter la morphologie du précipité. Par exemple, dans le cas des superalliages à base nickel, la présence de dislocations d'interface conduit à une modification de la morphologie de l'interface entre précipités et matrice sous la forme de dentelures (Vorontsov 12), voire de sillons lors de la croissance des précipités (Link 11). Dans le cas des alliages Al-Sc, Iwamura et al. (Iwamura 04) montrent que la perte de cohérence des précipités d' Al_3Sc modifie leur cinétique de mûrissement. Ces deux exemples mettent en évidence que les dislocations d'interface peuvent impacter l'évolution des précipités à la fois d'un point de vue morphologique et cinétique.

Comme indiqué dans le chapitre 1, le modèle d'élasticité non linéaire développé dans cette thèse peut être couplé de manière cohérente avec un modèle de champ de phase tenant compte de l'évolution microstructurale. Ce couplage permet d'étudier les interactions complexes entre dynamique des dislocations et évolution microstructurale, au cœur des phénomènes évoqués précédemment. Dans ce chapitre, nous nous proposons d'étudier les interactions entre dislocations et interfaces diffuses. Le système modèle choisi pour cette étude est l'aluminium-scandium dans lequel des précipités Al_3Sc jouent un rôle de durcissement structural.

Nous commençons par présenter dans la section 3.1 une courte revue bibliographique mettant en évidence que ces problématiques ont été jusqu'ici peu étudiées d'un point de vue théorique. Dans la section 3.2, nous décrivons les alliages Al-Sc et justifions leur choix dans le cadre de cette étude. Dans la section 3.3, nous proposons un modèle champ de phase pour l'alliage Al-Sc et le couplage avec le modèle d'élasticité non linéaire présenté dans le chapitre 1. Les sections suivantes présentent les résultats obtenus avec ce modèle. On s'attachera dans un premier temps à étudier l'influence des dislocations sur la morphologie d'une interface plane. On s'intéressera ensuite à

l'influence de ces dislocations sur la cinétique d'avancée de l'interface.

3.1 Études théoriques de l'influence des dislocations sur l'évolution microstructurale

Les interactions entre dislocations et microstructure en évolution sont à la frontière de deux domaines de la métallurgie physique, à savoir l'analyse des transformations de phase et l'étude des dislocations. Malgré quelques exceptions dans des cas simples (Cahn 57, Ham 59), ces problèmes sont difficiles à traiter analytiquement. L'introduction au cours des dernières décennies de nouvelles méthodes capables de traiter numériquement les interactions complexes entre dislocations et microstructure a généré un regain d'intérêt pour ces problèmes.

La nucléation inhomogène de précipités de seconde phase le long de dislocations est un phénomène bien connu. Les contraintes générées par les dislocations piègent les atomes de soluté et facilitent considérablement la nucléation de précipités. Ce phénomène a été largement utilisé pour l'observation des microstructures de dislocations en microscopie optique (Dash 56, Dash 58, Dollins 70) avant la généralisation des observations MET. Les méthodes de type champ de phase semblent un outil de choix pour l'étude de ce type de problème. Hu et al. (Hu 01) étudient la nucléation et l'évolution morphologique de précipités de seconde phase autour d'une dislocation. Cette approche a été généralisée au cas tridimensionnel (Luo 07). Néanmoins, dans ces approches, les dislocations sont fixes et leur évolution n'est pas prise en compte.

La décomposition spinodale est une autre phénoménologie où les dislocations peuvent jouer un rôle important qu'elles soient immobiles (Léonard 98, Li 09) ou mobiles (Haataja 04, Haataja 05). Ainsi, dans ce dernier cas, le couplage entre un modèle de décomposition spinodale et un modèle à base de densité de dislocations a permis de montrer que les dislocations mobiles peuvent impacter de manière significative la cinétique de décomposition. Rodney et al. (Rodney 01) ont également effectué des simulations de décomposition spinodale provoquée par le glissement d'une dislocation.

De nombreux autres travaux se concentrent sur l'évolution de dislocations dans une microstructure figée. La dynamique des dislocations est un outil particulièrement adapté à ce type de situation comme en témoigne la riche littérature sur ce sujet (par exemple (Vattré 09a, Vattré 10, Monnet 11)). Les auteurs de (Minami 04, Minami 05, Minami 07) utilisent un modèle très proche de celui décrit dans le chapitre 1 couplé à un modèle champ de phase tenant compte de l'évolution microstructurale. Cependant, ils ne s'attachent pas à étudier en détail l'influence des dislocations sur l'évolution microstructurale.

Afin d'étudier le comportement en fluage des alliages Ni-Al, des techniques de champ de phase ont été utilisées pour simuler simultanément le glissement des dislocations et les phénomènes diffusifs. Dans (Zhou 11), les auteurs couplent le modèle champ de phase pour les dislocations à une dynamique diffusive tenant compte de la réorganisation atomique des précipités cisailés par une dislocation. Ces mêmes auteurs (Zhou 10) étudient l'influence du glissement des dislocations sur l'évolution morphologique des précipités γ' et montrent que la déformation plastique générée par les dislocations accélère la mise en radeau des précipités. Cependant, les auteurs s'attachent davantage à étudier le comportement en fluage des alliages Ni-Al qu'à comprendre les mécanismes d'interaction entre dislocations et microstructure en évolution. Les interactions entre évolution microstructurale et déformation plastique a également été étudié par l'intermédiaire d'un couplage entre des approches champ de phase et des modèles de plasticité continue (Zhou 10, Gaubert 10, Cottura 12). Par exemple, Cottura et al.

(Cottura 12) utilisent un modèle viscoplastique à longueur interne qui rend compte des effets de corrélation à courte distance entre les dislocations. Dans le cas des superalliages à base nickel, les auteurs montrent que ces effets de corrélation ont un impact mineur sur la morphologie des précipités mais jouent un rôle important sur le comportement mécanique macroscopique.

On peut également noter les travaux de Lee et al. (Lee 96, Lee 98) qui développent une méthode Monte-Carlo à l'échelle atomique tenant compte des effets élastiques. En particulier, dans (Lee 98), les auteurs s'attachent à étudier le rôle des dislocations sur l'évolution microstructurale des précipités. Malgré l'intérêt qualitatif de ces résultats, il est difficile d'utiliser ce type de technique de manière quantitative. En effet, les grandeurs caractéristiques d'un système biphasé telles que les concentrations à l'équilibre des phases ainsi que l'énergie d'interface sont difficilement contrôlables avec ce type de modèle discret.

Ainsi, des modèles de différentes natures ont été développés afin d'étudier les interactions entre dislocations et évolution microstructurale. Cependant, aucun travail n'est consacré à l'influence des dislocations sur la morphologie de l'interface ni au devenir de ces dislocations dans le cas du déplacement de l'interface, malgré l'importance de ces phénomènes.

3.2 Description des alliages aluminium-scandium

Nous nous proposons d'étudier les interactions entre dislocations et microstructure en évolution dans un alliage aluminium-scandium. Notre choix s'est porté sur ce système du fait de sa relative simplicité (phases élastiquement quasi-isotropes, précipités isolés et sphériques, dislocations peu dissociées). Même s'ils sont peu utilisés dans l'industrie et peuvent paraître relativement exotiques, ces alliages ont fait l'objet de plusieurs études expérimentales et théoriques et sont aujourd'hui bien connus. Dans cette section, on décrira en premier lieu la phase Al_3Sc apparaissant dans cet alliage, puis son influence sur les propriétés mécaniques de l'alliage.

3.2.1 Description de la phase Al_3Sc

L'ajout de scandium dans l'aluminium conduit à la formation de précipités stœchiométriques Al_3Sc qui précipitent de manière cohérente avec la matrice. Ces précipités possèdent une structure L_{12} qui est énergétiquement la plus stable parmi les autres structures possibles (Clouet 04, Mao 11). Cette structure L_{12} est une structure ordonnée sur la maille CFC où les atomes d'aluminium sont situés sur les faces de la maille élémentaire et les atomes de scandium sur les sommets (figure 3.1.b). On peut noter qu'il existe quatre variants cristallographiques pour la structure L_{12} correspondant aux quatre choix possibles pour les sites occupés par le scandium. A température nulle, des calculs *ab initio* (Mao 11) montrent que la phase Al_3Sc possède un paramètre de maille $a_{\text{Al}_3\text{Sc}} = 4.1 \text{ \AA}$, supérieur à celui de l'aluminium pur $a_{\text{Al}} = 4.03 \text{ \AA}$. On définit le désaccord paramétrique (ou misfit) entre les deux phases comme :

$$\epsilon^{00} = 2 \frac{a_{\text{Al}_3\text{Sc}} - a_{\text{Al}}}{a_{\text{Al}_3\text{Sc}} + a_{\text{Al}}} \quad (3.1)$$

Du fait des différents coefficients de dilatation thermique des deux phases, le désaccord paramétrique varie de manière importante avec la température. Royset et al. (Royset 05c) ont ainsi caractérisé cette dépendance en prenant également en compte les effets élastiques des lacunes et du scandium en solution solide dans la matrice.

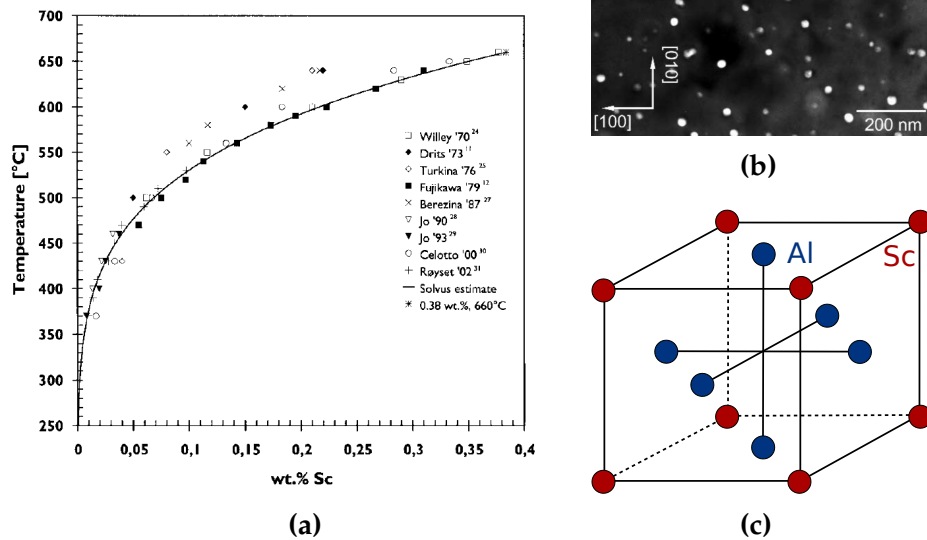


FIGURE 3.1 – (a) Diagramme de phase de l'alliage binaire Al-Sc (Royset 05b). (b) Microstructure d'un alliage Al-0.28%Sc recuit 5h à 673 K (Watanabe 04). (c) Structure cristallographique L_{12} de la phase Al_3Sc .

La figure 3.1.a présente une partie du diagramme de phase de l'alliage binaire Al-Sc (Royset 05b). On peut remarquer que la limite de solubilité du scandium dans l'aluminium est très faible, ce qui conduit à l'apparition de précipités Al_3Sc même pour des concentrations en Sc marginales. Les précipités d' Al_3Sc apparaissent généralement comme sphériques (figure 3.1.b) (Hyland 92, Novotny 01, Marquis 01, Watanabe 04, Royset 05b). Des images MET haute résolution (Marquis 01, Royset 05b) montrent cependant une morphologie facettée attribuée à une légère anisotropie de l'énergie d'interface. Lors de l'étape de croissance, des morphologies en "étoile" ou en "choux-fleur" sont également observées (Marquis 01, Novotny 01, Tsivoulas 06). Cette morphologie est probablement due à une instabilité de croissance selon certaines directions cristallographiques comme l'indiquent les simulations champ de phase de Boisse (Boisse 08). Une morphologie légèrement cuboïdale est également observée lorsque la taille des précipités atteint plusieurs dizaines de nanomètres (Marquis 01, Novotny 01, Watanabe 04). Cette morphologie est attribuée à des effets élastiques. La cinétique de nucléation, croissance et mûrissement de ces précipités a été largement étudiée dans la littérature (Hyland 92, Novotny 01, Marquis 01, Clouet 04, Clouet 05, Boisse 08). La faible fraction volumique de précipités et l'absence de phases intermédiaires métastables permettent une bonne comparaison avec l'approche théorique de Lifshitz, Slyozov et Wagner (LSW).

L'énergie d'interface entre l'aluminium CFC et la phase Al_3Sc a fait l'objet de plusieurs études expérimentales (Hyland 92, Jo 93, Robson 03, Watanabe 04, Iwamura 04, Royset 05a) et théoriques (Hyland 98, Asta 98). Ces différentes études sont résumées dans un article de revue (Royset 05b). On note la grande dispersion des résultats qui varient entre 10 mJ/m² et 300 mJ/m². Une étude expérimentale en fonction de la température (Royset 05a) indique que l'énergie d'interface dépend considérablement de la température, ce qui permet d'expliquer les écarts importants entre les différentes valeurs présentes dans la littérature.

Au cours de la croissance des précipités d' Al_3Sc , leur perte de cohérence est généralement observée lorsque le rayon du précipité atteint une valeur critique (Drits 84,

Tsivoulas 06, Jones 03, Iwamura 04, Royset 05c). Cette perte de cohérence est caractérisée par l'apparition de dislocations à l'interface précipité/matrice qui relaxent les contraintes de misfit. Les rayons critiques de perte de cohérence sont compris entre 15 nm et 40 nm. Royset et al. (Royset 05c) montrent que les différents rayons critiques mesurés dépendent fortement de la température du fait de la dépendance du désaccord paramétrique en fonction de la celle-ci. L'impact de l'apparition de dislocations d'interface sur la cinétique de mûrissement a également été caractérisée (Iwamura 04). Les auteurs montrent que la perte de cohérence des précipités accélère la cinétique de mûrissement car le réseau de dislocations augmente l'énergie d'interface effective. On peut également noter qu'après la perte de cohérence, les précipités conservent une forme sphérique (Iwamura 04).

3.2.2 Influence des précipités Al_3Sc sur les propriétés mécaniques

Comme tous les métaux CFC, l'aluminium possède 12 systèmes de glissement de type $\frac{a}{2}(111)[1\bar{1}0]$ (où a désigne le paramètre de maille de l'aluminium). Les dislocations se dissocient généralement en deux partielles de Shokley séparées par une faute d'empilement intrinsèque (ISF ¹) suivant la réaction :

$$\frac{a}{2}[1\bar{1}0] \rightarrow \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}] + \text{ISF} + \frac{a}{6}[1\bar{2}1] \quad (3.2)$$

Dans le cas de l'aluminium, l'énergie de l'ISF est de l'ordre de 125 mJ/m² (Kibey 07, Woodward 08), valeur relativement élevée comparée à celles des autres métaux CFC. Ceci conduit à une distance de dissociation faible comprise entre 5 et 10 Å selon la méthode employée et le caractère de la dislocation (Woodward 08). Ces dislocations interagissent avec les précipités Al_3Sc , ce qui conduit à un effet de durcissement structural et à une hausse de la limite d'élasticité (Royset 05b, Seidman 02, Marquis 03). Ce durcissement structural est fonction de plusieurs ingrédients qui régissent les interactions entre dislocations et précipités.

Lorsqu'une dislocation $\frac{a}{2}[1\bar{1}0]$ pénètre dans un précipité Al_3Sc , l'ordre de la phase L_{12} est modifié sur la zone balayée par la dislocation : la dislocation laisse derrière elle une paroi d'antiphase (APB ²). George et al. (George 90) déduisent une valeur de l'énergie d'APB de 313 mJ/m² à partir d'observations MET de paires de dislocations $\frac{a}{2}[1\bar{1}0]$. Une étude *ab initio* réalisée par Fu (Fu 90) conclut à une valeur plus élevée de 670 mJ/m². Cette énergie d'APB prévient le cisaillement des précipités Al_3Sc par les dislocations de la matrice, ce qui provoque un effet de durcissement structural important. Le désaccord paramétrique ainsi que la différence des constantes élastiques entre les phases contribuent en moindre mesure à l'effet de durcissement structural. Selon la taille et la densité des précipités, deux mécanismes de déformation sont observés :

- Pour les densités élevées de petits précipités, ces derniers sont cisailés par les dislocations qui parcourent la distribution de précipités par paires (Seidman 02) (le passage de deux dislocations $\frac{a}{2}[1\bar{1}0]$ cisailant un précipité Al_3Sc dans le même plan de glissement permet de retrouver l'ordre initial de la phase).
- Pour les faibles densités de gros précipités, les dislocations contournent les précipités par un mécanisme d'Orowan. Ce mécanisme est mis en évidence par des observations MET de boucles circulaires autour des précipités (Seidman 02).

Le pic de durcissement, c'est-à-dire le durcissement optimal pour une concentration donnée en scandium, est obtenu pour une taille de précipité critique à la limite entre ces deux mécanismes.

1. Intrinsic Stacking Fault

2. Anti-Phase Boundary

Enfin, un autre effet connu des précipités Al_3Sc est leur capacité à stabiliser la structure de grains/sous-grains par un effet d'épinglage de Zener (Royset 05b, Jones 03, Min 05). Les précipités Al_3Sc apportent donc un effet anti-recristallisant bénéfique.

3.3 Développement d'un modèle de champ de phase pour l'alliage Al-Sc

L'évolution microstructurale des alliages Al-Sc a été peu étudiée en champ de phase. Boisse (Boisse 08) propose un modèle de champ de phase en paramètre d'ordre pour étudier la croissance et la coalescence des précipités Al_3Sc . Ce modèle communément utilisé pour l'étude des transformations de phase de type L_{12} (Boussinot 07, Boisse 08, Gaubert 09, Cottura 13) repose sur des paramètres d'ordre à longue distance qui caractérisent les différents variants de la structure L_{12} . L'avantage de ce formalisme est qu'il permet de prendre en compte les parois d'antiphase apparaissant lors de la coalescence des précipités tout en conservant une échelle mésoscopique.

Dans cette étude, nous n'avons pas besoin de mettre en place un tel formalisme car nous nous intéressons aux interactions entre des dislocations et un précipité unique. Ainsi, nous n'avons besoin que d'un seul champ, la concentration en scandium, pour caractériser l'évolution microstructurale. On s'intéresse au comportement de l'alliage à une température de 800 K où les concentrations atomiques à l'équilibre dans la matrice et le précipité sont respectivement $c_m = 0.09\%$ et $c_p \simeq 25\%$ (figure 3.1.a).

3.3.1 Energie libre du système

On note c la concentration atomique en scandium. La fonctionnelle d'énergie du système est définie comme l'intégrale sur le volume d'une contribution élastique f_{el} , d'une contribution chimique f_{ch} ainsi que d'un terme de gradient f_{grad} qui pénalise les variations spatiales du champs c et permet d'introduire une interface diffuse entre les phases.

$$\mathcal{F} = \int dr^3 \{f_{el}(c, \epsilon) + f_{grad}(c) + f_{ch}(c)\} \quad (3.3)$$

L'énergie chimique du système est choisie comme la somme d'un polynôme d'ordre 5 et d'un terme logarithmique qui permet de reproduire correctement le comportement entropique de la limite diluée (ce qui est important ici car la phase désordonnée est précisément stabilisée dans ce domaine) :

$$f_{ch}(c) = a_0 + a_1c + a_2c^2 + a_3c^3 + a_4c^4 + a_5c^5 + \frac{kT}{\Omega} (c \ln(c) + (1 - c) \ln(1 - c)) \quad (3.4)$$

où les a_i sont des coefficients constants, kT désigne l'énergie thermique et Ω est le volume atomique de l'aluminium. Le potentiel chimique dérivant de cette énergie libre diverge pour $c \rightarrow 0$ et $c \rightarrow 1$, ce qui permet d'assurer que la concentration demeure entre 0 et 1, y compris proche du cœur des dislocations où les interactions élastiques entre les dislocations et le champ de concentration sont importantes.

Nous avons vu que l'énergie d'interface $\text{Al}_3\text{Sc}/\text{Al}$ est légèrement anisotrope, ce qui conduit à l'apparition de précipités facettés (Marquis 01). Néanmoins, pour des raisons de simplicité, on néglige cette anisotropie et on introduit une énergie de gradient isotrope :

$$f_{grad}(c) = \frac{G}{2} ||\nabla c||^2 \quad (3.5)$$

Nous verrons dans le paragraphe suivant comment choisir les coefficients a_i et G afin de reproduire les concentrations des phases à l'équilibre ainsi que l'énergie et la largeur d'interface désirées.

La dernière contribution énergétique est l'énergie élastique f_{el} . Afin de prendre en compte la dynamique des dislocations, on considère l'énergie élastique périodique du modèle décrit dans le chapitre 1 (Eq. 1.31) :

$$f_{el}(\epsilon, c) = \sum_{i,j=1}^3 \frac{C_{ijij}}{2} (\epsilon_{ii} - \epsilon_{ii}^0(c)) (\epsilon_{jj} - \epsilon_{jj}^0(c)) + \sum_{i<j} p_{ij}(c, \epsilon_{ij}) \quad (3.6)$$

Les fonctions périodiques p_{ij} dépendent de la concentration c afin de tenir compte de l'inhomogénéité des constantes élastiques des phases Al et Al₃Sc et de l'énergie de paroi d'antiphase. Le paragraphe 3.3.3 détaille le choix des constantes élastiques et des fonctions p_{ij} .

3.3.2 Paramétrage des fonctions f_{ch} et f_{grad}

Les coefficients a_i du polynôme et le coefficient G du terme de gradient doivent être paramétrés afin de reproduire les concentrations à l'équilibre, l'énergie et l'épaisseur de l'interface.

Afin de reproduire deux phases stables ainsi qu'une interface entre ces deux phases, l'allure du potentiel f_{ch} doit être celle d'un double-puits avec deux minima en c_m et c_p . Pour nous aider à paramétrer le système, on s'intéresse tout d'abord au cas simple d'un potentiel double-puits symétrique prenant la forme d'un polynôme d'ordre quatre pour lequel l'examen analytique est bien connu (Cahn 58, Bray 02, Bronchart 06). L'énergie libre de ce système simplifié s'écrit en 1D :

$$\mathcal{F}_s = \int dx \left\{ \frac{16\Delta F}{(c_p - c_m)^4} (c - c_m)^2 (c - c_p)^2 + \frac{G}{2} \left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)^2 \right\} \quad (3.7)$$

où ΔF désigne la hauteur du double puits (voir figure 3.2.a). L'équilibre du système est obtenu en annulant la dérivée fonctionnelle $\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta c} = 0$. La solution analytique du profil à l'équilibre de c entre une phase où $c = c_m$ ($x < 0$) et une phase où $c = c_p$ ($x > 0$) prend la forme d'une tangente hyperbolique :

$$c(x) = \frac{c_p - c_m}{2} \left(\tanh \left(\frac{2x}{w} \right) + 1 \right) + c_m \quad (3.8)$$

où $w = (c_p - c_m) \sqrt{G/2\Delta F}$ est l'épaisseur de l'interface. L'énergie de l'interface peut être calculée analytiquement et vaut $E_{int} = \frac{2}{3} (c_p - c_m) \sqrt{2G\Delta F}$. Ainsi, si on désire reproduire une épaisseur w et une énergie d'interface E_{int} données, on peut choisir les coefficients G et ΔF comme :

$$\begin{cases} G &= 3E_{int}w / (2(c_p - c_m)^2) \\ \Delta F &= 3E_{int}/4w \end{cases} \quad (3.9)$$

On utilise maintenant ces éléments pour paramétrer notre système. Afin de déterminer les coefficients a_i du potentiel chimique, on impose certaines conditions. Par simplicité, on considère que les énergies libres des deux phases sont nulles aux concentrations d'équilibre, $f_{ch}(c_p) = f_{ch}(c_m) = 0$. Les dérivées en c_p et c_m doivent également être nulles afin de retrouver deux minima locaux. On désire contrôler la hauteur du potentiel séparant les deux phases de manière indépendante. Pour cela, on impose $f_{ch}((c_m + c_p)/2) = \Delta F$ et $f'_{ch}((c_m + c_p)/2) = 0$. L'ensemble de ces contraintes peut s'écrire sous la

forme d'un système linéaire d'ordre 6. La résolution de ce système permet d'obtenir les coefficients a_i en fonction des grandeurs c_p , c_m , ΔF .

La figure 3.2.a représente l'allure de la fonction f_{ch} paramétrée pour $\Delta F = 0.4 \text{ eV/nm}^3$. On remarque que pour $c \in [c_m, c_p]$, l'allure de la densité d'énergie libre est proche du potentiel double-puits de l'équation 3.7. Cela justifie l'utilisation de l'équation 3.9 pour estimer les coefficients G et ΔF à partir des données expérimentales de l'énergie et de l'épaisseur des interfaces précipité/matrice.

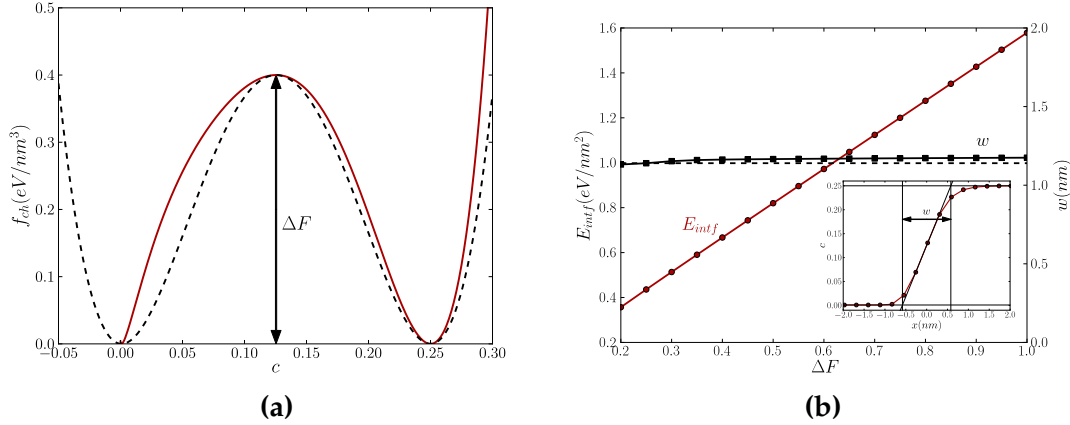


FIGURE 3.2 – (a) Densité d'énergie libre chimique $f_{ch}(c)$ pour le cas de la fonction simplifiée de l'équation 3.7 (pointillés noirs) et pour la fonction de l'équation 3.4 paramétrée ; (b) variation de l'énergie d'interface en fonction de ΔF (en rouge) en conservant une épaisseur d'interface de l'ordre de 1.14 nm (en noir). L'épaisseur de l'interface est calculée par la méthode de la tangente (voir encart)

En particulier, dans la suite du chapitre, on fera varier l'énergie d'interface en gardant une épaisseur d'interface $w = 1.14 \text{ nm}$. La figure 3.2.b montre l'évolution en fonction du paramètre ΔF de l'énergie d'interface obtenue par intégration numérique de l'énergie le long du profil d'équilibre. Sur la même figure, la courbe noire représente l'évolution de l'épaisseur numérique. On voit que quel que soit le choix de ΔF , l'utilisation de l'équation 3.9 permet de conserver une épaisseur d'interface autour de la valeur désirée de 1.14 nm (en pointillés). L'encart de la figure représente l'évolution de c à travers l'interface entre les deux phases. On constate premièrement que l'interface est légèrement asymétrique du fait de l'asymétrie de l'énergie libre. L'épaisseur de l'interface est calculée en prolongeant la tangente à l'origine et en identifiant les points d'intersection avec les valeurs des concentrations des deux phases (encart de la figure 3.2). Il faut souligner que pour $\Delta F < 0.2 \text{ eV/nm}^3$, la technique de détermination des coefficients a_i conduit à l'apparition de minima locaux supplémentaires pour $c \in [c_m, c_p]$ dans le profil de l'énergie libre, ce qui n'est évidemment pas désiré.

Nous avons vu dans la section 3.2.1 qu'il existe une dispersion importante entre les différentes mesures de l'énergie d'interface dans la littérature. Les travaux de Royset et al. (Royset 05a) montrent que l'énergie de l'interface Al/Al₃Sc varie avec la température et leur étude indique qu'à 800 K, le choix de $E_{int} = 100 \text{ mJ/m}^2$ (0.63 eV/nm^2) semble raisonnable. Cette valeur est obtenue pour $\Delta F = 0.4$. Dans la suite, on s'autorisera à faire varier l'énergie d'interface entre 57 mJ/m^2 (0.36 eV/nm^2) et 253 mJ/m^2 (1.58 eV/nm^2) afin de tester son influence.

3.3.3 Paramétrage de l'énergie élastique

Les constantes élastiques de la phase Al₃Sc ont été déterminées expérimentalement (Hyland 91). Des études *ab initio* portant sur ce système trouvent des valeurs très proches

(Woodward 01, Mao 11). Les constantes élastiques de l'aluminium et de la phase Al_3Sc sont reportées dans le tableau 3.1. Afin de caractériser l'anisotropie du matériau, on calcule le coefficient d'anisotropie $A = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12})$ ($A = 1$ pour un matériau parfaitement isotrope). Dans le cas de l'aluminium pur et de la phase Al_3Sc , les coefficients d'anisotropie sont proches de l'unité. L'anisotropie dans ces matériaux peut donc être considérée comme faible. Par simplicité, on se placera dans un cadre parfaitement isotrope. Les coefficients de Lamé λ et μ utilisés par la suite sont obtenus à partir de l'approximation isotrope de Voigt (Hirth 68) :

$$\begin{aligned}\mu &= (C_{11} - C_{12} + 3C_{44})/5 \\ \lambda &= (C_{11} + 4C_{12} - 2C_{44})/5\end{aligned}\tag{3.10}$$

	C_{11}	C_{12}	C_{44}	A	λ	μ	ν
Al	107	61	28	1.22	59	26	0.35
Al_3Sc	183	46	68	0.99	46	68	0.2

TABLE 3.1 – Constantes élastiques (Ashcroft 76, Hyland 91), coefficients d'anisotropies et approximations isotrope de Voigt (Hirth 68) pour l'aluminium pur et la phase Al_3Sc .

Afin de paramétrer les fonctions p_{ij} , une première approche qualifiée de *bottom-up* consiste à utiliser des méthodes *ab initio* pour calculer une γ -surface pour les phases Al et Al_3Sc . Les calculs à l'échelle atomique permettent en effet d'obtenir l'énergie du système en fonction du déplacement relatif de deux plans atomiques successifs. On peut alors projeter la fonction obtenue sur une base finie de fonctions périodiques et déterminer les coefficients devant chacun des termes. Une interpolation de ces coefficients en fonction de la concentration permet d'obtenir les fonctions p_{ij} pour une concentration quelconque. Bien que très pertinente, cette approche présente certains inconvénients. Premièrement, elle repose sur des calculs *ab initio* qui sont effectués à température nulle alors que le paramètre de maille et l'énergie d'APB dépendent de la température. De plus, la taille de la base des fonctions périodiques doit être suffisamment grande pour reproduire fidèlement les γ -surfaces. Plus la base des fonctions périodiques est grande, plus le nombre de termes à évaluer lors de la résolution de l'équilibre mécanique est important, ce qui peut introduire des coûts de calcul importants. D'un point de vue plus pratique, la détermination des γ -surfaces nécessite la prise en main d'un logiciel de calcul *ab initio* et peut s'avérer longue et fastidieuse.

Pour ces raisons, nous préférons adopter une approche *top-down* en considérant un potentiel périodique simplifié paramétré afin de reproduire les principales grandeurs caractéristiques du problème, c'est-à-dire la bonne périodicité, l'énergie d'APB et les constantes élastiques.

Comme mentionné dans le paragraphe 3.2.2, la longueur de dissociation des dislocations $\frac{a}{2}[110]$ est faible. On se permettra donc de négliger les effets issus de cette dissociation et on choisira arbitrairement la largeur du cœur. Néanmoins, on conserve le paramètre α introduit dans le chapitre 1 permettant de modifier la structure de cœur des dislocations et la contrainte de Peierls. On considère donc un potentiel périodique de la forme suivante :

$$p(c, \varepsilon) = k_1(c) \left[1 - \cos\left(\frac{\pi\varepsilon}{\hat{\varepsilon}}\right) \right] + k_2(c) \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi\varepsilon}{\hat{\varepsilon}}\right) \right] + k_3(c) \left[1 - \cos\left(\frac{4\pi\varepsilon}{\hat{\varepsilon}}\right) \right]\tag{3.11}$$

où $\hat{\varepsilon} = b/2d$ est la déformation caractéristique du passage d'une dislocation $\frac{a}{2}[110]$ et les coefficients k_1 , k_2 et k_3 sont paramétrés avec α , E_{APB} et μ afin de retrouver l'élas-

ticité linéaire dans les deux phases pour les petites déformations quel que soient α et E_{APB} . En désignant la matrice d'aluminium et la phase Al_3Sc par les exposants m et p respectivement, on a :

$$\begin{aligned}
 k_1^m &= 0 \\
 k_2^m &= \left(\frac{\alpha^m}{2} + 1 \right) \frac{\mu^m \hat{\varepsilon}^2}{\pi^2} \\
 k_3^m &= -\frac{\alpha^m}{8} \frac{\mu^m \hat{\varepsilon}^2}{\pi^2} \\
 k_1^p &= \frac{E_{APB}}{2} \\
 k_2^p &= \left(\frac{\alpha^p}{2} + 1 \right) \left(\frac{\mu^p \hat{\varepsilon}^2}{\pi^2} - \frac{E_{APB}}{8} \right) \\
 k_3^p &= -\frac{\alpha^p}{8} \left(\frac{\mu^p \hat{\varepsilon}^2}{\pi^2} - \frac{E_{APB}}{8} \right)
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

La figure 3.3.a représente la fonction périodique p_{23} avec ce jeu de paramètres. Pour une concentration quelconque en scandium, les coefficients k_1, k_2, k_3 sont interpolés au moyen d'un polynôme d'ordre 3 noté $h(c)$ représenté sur la figure 3.3.b :

$$k_i(c) = k_i^p h(c) + k_i^m (1 - h(c)) \quad \text{avec} \quad h(c) = \frac{(c - c_m)^2}{(c_p - c_m)^3} (3c_p - c_m - 2c) \tag{3.13}$$

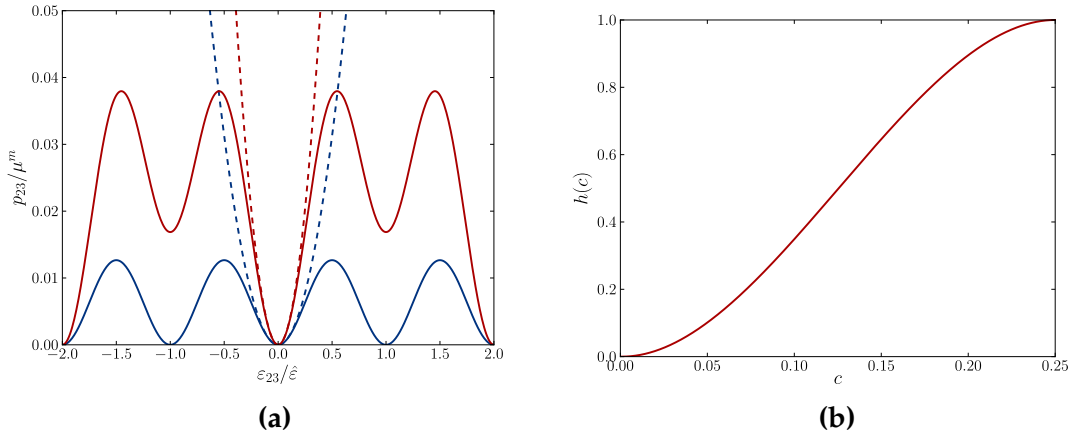


FIGURE 3.3 – (a) Fonctions périodiques pour la matrice ($c = c_m$) en bleu et la phase Al_3Sc ($c = c_p$) en rouge pour $\alpha^m = \alpha^p = 0$. (b) Fonction d'interpolation $h(c)$.

Dans la suite, on prendra pour l'énergie de paroi d'antiphase une moyenne des valeurs disponibles dans la littérature (George 90, Fu 90), soit $E_{APB} = 500 \text{ mJ/m}^2$.

3.3.4 Equations dynamiques

Séparation des échelles de temps

Avant de construire les équations dynamiques qui régissent l'évolution du système, on doit d'abord distinguer deux mécanismes qui ont lieu à des échelles de temps très distinctes. Les phénomènes displacifs, tels que la mise à l'équilibre élastique et le déplacement des dislocations, sont en général beaucoup plus rapides que les évolutions

microstructurales contrôlées par la diffusion. Pour s'en convaincre, on peut comparer les temps caractéristiques des deux phénomènes.

L'échelle de temps du déplacement des dislocations est obtenue à partir du coefficient de traînée de phonons B qui régit la dynamique des dislocations via l'équation $v = \sigma^a b / B$. Il est bien connu que ce coefficient dépend de la température (Kubin 13) et des simulations de dynamique moléculaire (Kuksin 08) montrent que pour l'aluminium, $B(T) = B(300 \text{ K}) \cdot T/300$ avec $B(300 \text{ K}) = 1.4 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$. Ce résultat est en bon accord avec les valeurs expérimentales présentes dans la littérature (Gorman 69, Hikata 70). Ainsi, le temps caractéristique associé au déplacement des dislocations à 800 K est $\tau_m = B/\sigma^a = 3.73 \cdot 10^{-13} \text{ s}$ en considérant que la contrainte subie par la dislocation est $\sigma^a = 100 \text{ MPa}$.

D'autre part, les mécanismes diffusifs mis en jeu lors de l'évolution microstructurale sont beaucoup plus lents. Le coefficient de diffusion du scandium dans l'aluminium s'exprime comme $D_{Sc} = D_{Sc}^0 \exp(-E_m/kT)$, avec $D_{Sc}^0 = 5.31 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ et $E_m = 1.79 \text{ eV}$ (Madelung 90). On s'intéresse à la diffusion du soluté à l'échelle de la dislocation, l'échelle de longueur associée est donc de l'ordre de b . Le temps caractéristique associé à la diffusion du scandium à 800 K sur cette distance est $\tau_d = b^2/D_{Sc} = 2.9 \cdot 10^{-5} \text{ s}$.

Ainsi, 8 ordres de grandeur séparent les temps caractéristiques de la diffusion et du déplacement des dislocations. L'utilisation d'un pas de temps commun pour les deux équations n'est pas envisageable étant donnée la trop grande différence entre les échelles de temps des deux mécanismes. Afin d'assurer cette séparation d'échelles de temps, on résout l'équilibre mécanique avant chaque pas de temps de l'équation de diffusion.

Dynamique du champ de concentration

On va maintenant détailler les équations dynamiques qui régissent l'évolution du champ de concentration et la résolution de l'équilibre mécanique. Le champ de concentration est conservé et suit une dynamique diffusive de type Cahn-Hilliard :

$$\dot{c} = \nabla \cdot M(c) \nabla \mu(\{c\}, \{\varepsilon\}) \quad (3.14)$$

où $\mu(\{c\}, \{\varepsilon\})$ désigne le potentiel chimique et $M(c)$ la mobilité de l'espèce. Par définition, le potentiel chimique est égal à la variation d'énergie libre associée à une variation marginale de concentration. Dans le cas présent, on suppose que les degrés de liberté mécaniques, c'est-à-dire les champs de déplacements $\{u_i\}$, sont instantanément relaxés. Ces champs deviennent donc des fonctionnelles du champ de concentration. L'énergie libre totale devient alors une fonctionnelle du seul champ de concentration :

$$\mathcal{F}^{eq}(\{c\}) = \mathcal{F}(\{c\}, \{u_i^{eq}\}) \quad (3.15)$$

où $\{u_i^{eq}\}$ est le champ de déplacement associé à l'équilibre mécanique. Le potentiel chimique est donc donné par :

$$\mu(\{c\}) = \frac{\delta \mathcal{F}^{eq}(\{c\})}{\delta c} = \frac{\delta \mathcal{F}(\{c\}, \{u_i^{eq}\})}{\delta c} + \int dr' \left. \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta u_i(r')} \right|_{u_i=u_i^{eq}} \frac{\delta u_i^{eq}(r')}{\delta c(r)} \quad (3.16)$$

Puisque l'équilibre mécanique est supposé atteint, le second terme est nul et on obtient :

$$\mu(\{c\}) = \frac{\partial f_{ch}}{\partial c} + \frac{\partial f_{el}}{\partial c} - G \nabla^2 c \quad (3.17)$$

On choisit de considérer une mobilité dépendante de la concentration afin de reproduire la diffusion du scandium dans l'aluminium dans la limite diluée où $c \rightarrow 0$. Dans

cette limite, le terme logarithmique du potentiel chimique diverge et est prédominant face aux termes du polynôme et aux autres contributions. Ainsi, le potentiel chimique devient

$$\mu_{c \rightarrow 0} \simeq \frac{kT}{\Omega} \ln(c) \quad (3.18)$$

Le choix d'une mobilité linéaire du type $M(c) = D_{Sc}\Omega c/kT$ permet de retrouver la loi de Fick qui régit la diffusion du soluté dans la limite diluée :

$$\dot{c} = D_{Sc}\Delta c \quad (3.19)$$

De plus, le choix d'une telle mobilité pour les faibles concentrations permet d'éviter des problèmes numériques liés à la divergence du potentiel chimique dans cette limite. Une mobilité linéaire en c sur l'ensemble des concentrations n'est cependant pas très réaliste. En effet, il n'y a aucune raison que la mobilité dans la phase Al_3Sc où $c \simeq 0.25$ soit déduite d'une extrapolation valable pour les faibles concentrations en scandium. De plus, une forte valeur de la mobilité dans la phase Al_3Sc obligerait à choisir un pas de temps réduit, ce qui limite les potentialités du modèle. Pour palier ces difficultés, on choisit finalement une mobilité de la forme³

$$M(c) = \frac{c_{th}\Omega D_{Sc}}{kT} \left(1 - e^{c/c_{th}}\right) \quad (3.20)$$

avec c_{th} une concentration seuil qui définit la limite entre un régime dilué où la mobilité est linéaire en c et un régime où la mobilité est constante. On fixe arbitrairement $c_{th} = 0.01$.

Résolution de l'équilibre élastique

L'équilibre mécanique est résolu avant chaque pas de temps de la diffusion. Une manière simple d'obtenir l'équilibre mécanique consiste à effectuer une dynamique dissipative semblable à celle présentée dans le chapitre 1. Une telle dynamique peut être vue comme une méthode de minimisation dont les itérations successives convergent vers l'état d'équilibre :

$$\varepsilon_{ij}^{n+1} = \varepsilon_{ij}^n + \frac{\Gamma}{2} \left[\frac{\partial^2 \sigma_{ik}^n}{\partial x_j \partial x_k} + \frac{\partial^2 \sigma_{jk}^n}{\partial x_i \partial x_k} \right] \quad (3.21)$$

où Γ est un coefficient de relaxation choisi le plus grand possible afin d'assurer une convergence rapide vers le minimum, mais suffisamment petit pour éviter les instabilités numériques. On doit également définir un critère pour arrêter cette dynamique dissipative lorsqu'on est suffisamment proche de l'équilibre. Ce critère est fixé sur les variations des champs de déformation entre deux itérations successives. Le processus de minimisation est stoppé lorsque :

$$\max_{i,j,r} \left| \varepsilon_{ij}^{n+1}(r) - \varepsilon_{ij}^n(r) \right| < \Gamma \varepsilon_{th} \quad (3.22)$$

où ε_{th} est une déformation seuil très petite : $\varepsilon_{th} = 10^{-6} b/d$. Nous avons vérifié que cette valeur est suffisamment petite pour ne pas avoir d'influence sur la dynamique du système et sur les résultats présentés dans ce chapitre.

Contrairement aux chapitres 1 et 2, nous ne nous intéressons pas particulièrement à la dynamique des dislocations à proprement dite, c'est à dire aux états mécaniques

3. D'autres formes sont possibles, pourvu qu'elles vérifient les mêmes propriétés, c'est-à-dire une mobilité linéaire en c dans la limite diluée et à peu près constante dans la phase ordonnée.

intermédiaires du système avant que celui-ci atteigne l'équilibre élastique ; seul l'état d'équilibre mécanique nous intéresse. L'équation de minimisation 3.21 présente l'avantage d'être simple à implémenter et très facile à paralléliser (voir annexe A.3). Pour ces raisons, nous conservons cette dynamique pour déterminer l'état d'équilibre du système. Toutefois, on peut noter qu'il existe des techniques de minimisation bien plus efficaces pour la résolution de ce type de problème telles que la méthode de Newton-Raphson ou la méthode du gradient conjugué. Mais l'implémentation de telles techniques ainsi que leur parallélisation aurait nécessité un effort supplémentaire que nous n'avons pas réalisé.

3.3.5 Adimensionnement et résolution numérique du modèle

Les équations sont normalisées par les grandeurs suivantes. La longueur caractéristique est la norme du vecteur de Burgers b . On choisit l'énergie mécanique $\mu^m b^3$ comme énergie caractéristique. Le temps caractéristique b^2 / D_{Sc} est celui de la diffusion sur une distance b .

Une fois adimensionnées, les équations sont discrétisées sur une grille différences finies décalée décrite dans le chapitre 1. On a vu dans le chapitre 1 que le choix du pas de grille était important afin de reproduire les champs de contraintes près du cœur de la dislocation. Ces contraintes sont fondamentales pour reproduire quantitativement les interactions entre dislocations et microstructures en évolution que nous voulons étudier dans ce chapitre. Pour cette raison, on choisit un pas de grille de l'ordre de la distance inter-atomique $d = b$.

3.4 Influence des dislocations sur la morphologie d'une interface plane

On a vu que la perte de cohérence des précipités conduisait à l'apparition de dislocations à l'interface précipité/matrice. D'autre part, la déformation plastique des matériaux s'effectue par glissement de dislocations qui interagissent avec les précipités et peuvent par exemple laisser des boucles d'Orowan autour de ceux-ci. Les contraintes générées par les dislocations présentes à l'interface peuvent conduire à une modification de la morphologie de l'interface qui adapte sa structure aux champs de contraintes des dislocations. Dans cette section, on cherche à caractériser l'influence des dislocations sur la morphologie d'une interface plane.

3.4.1 Observations expérimentales

Etant donnée la petite taille des précipités d' Al_3Sc , la structure des dislocations d'interface ainsi que leur influence sur la microstructure est difficile à observer et à analyser. On peut toutefois noter que les observations de la perte de cohérence des précipités d' Al_3Sc ne s'accompagnent pas d'une modification importante de leur morphologie qui reste sphérique (Iwamura 04).

Les interactions entre dislocations d'interface et microstructures en évolution ont été davantage étudiées dans le cadre des alliages nickel-aluminium qui sont relativement proche du système Al-Sc. En effet, les alliages Ni-Al sont composés d'une matrice CFC notée γ et de précipités cuboïdaux de structure ordonnée L_{12} notés γ' . Ces alliages présentent de larges précipités γ' (par exemple 450 nm pour l'alliage AM1 (Gaubert 09)) avec de grandes fractions volumiques (80% pour l'alliage AM1 (Gaubert 09)). Les larges

interfaces planes présentes dans ce système rendent plus facile l'observation de dislocations d'interface et leur interaction avec les précipités en évolution.

Vorontsov et al. (Vorontsov 12) étudient le comportement des dislocations d'interface dans un alliage base nickel, le CMSX-4 déformé sous 750 MPa à 750 °C. Sous l'effet de la contrainte, des dislocations $\frac{a}{2}[110]$ peuplent les interfaces de normale $[100]$. Grâce aux observations TEM reportées sur les figures 3.4.a et 3.4.b, les auteurs mettent en évidence que ces dislocations modifient localement la morphologie de l'interface qui adopte une forme crénelée permettant de relaxer les champs de contrainte des dislocations. Lors du fluage de ces alliages, la montée des dislocations est activée et celles-ci contournent les précipités γ' par un mécanisme de montée et de glissement le long de l'interface. Les auteurs notent que ces mécanismes de contournement peuvent être significativement freinés par la modification de la morphologie qui induit un couplage entre la dislocation et l'interface.

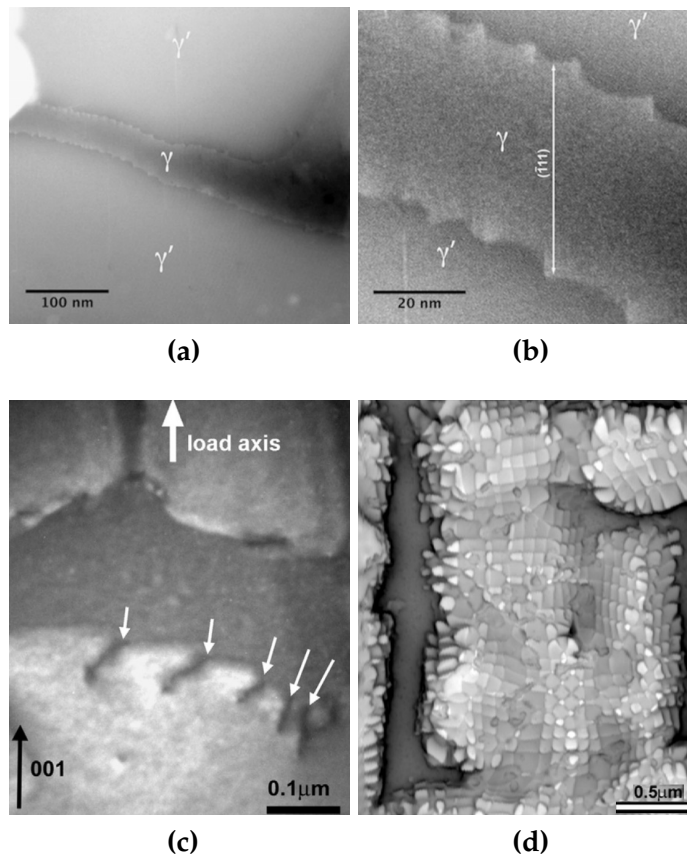


FIGURE 3.4 – (a,b) Observations MET de l'influence de dislocations $\frac{a}{2}[110]$ sur la morphologie de l'interface des précipités γ' dans un alliage Ni-Al CMSX-4 (Vorontsov 12). (c) Observations MET de sillons (indiqués par des flèches) dans la phase γ' créée par des dislocations (Link 11) après croissance de la phase γ' . (d) : L'existence de tels sillons permet l'observation des structures de dislocations au MEB (Epishin 07, Link 11).

D'autres études (Epishin 07, Link 11) s'intéressent également à l'influence des dislocations sur la structure de l'interface dans les alliages Ni-Al. Après un traitement thermique de 300 h à 1100 °C, Link et al. (Link 11) observent l'apparition de sillons à l'interface γ/γ' dus aux dislocations d'interface (voir figure 3.4.c). Les auteurs montrent que ces sillons sont dus à une légère croissance des précipités γ' lors du refroidissement. Les dislocations ne suivent pas l'interface car elles subissent une force de montée provenant d'une sursaturation en lacunes. Au fur et à mesure de la croissance du précipité,

les dislocations creusent des sillons à partir de l'interface. La formation de tels sillons rend possible l'observation des structures de dislocations en microscopie électronique à balayage (MEB) (Epishin 07) (voir figure 3.4.d).

3.4.2 Approche analytique

On propose tout d'abord une approche analytique afin de caractériser l'influence des dislocations sur la morphologie de l'interface. On se place dans le cas simple d'un matériau biphasé dont les deux phases sont isotropes et possèdent les mêmes constantes élastiques. On s'intéresse à une interface plane entre les deux phases et à une distribution régulière de dislocations d'interface séparées d'une distance L (voir figure 3.5). On suppose que la seconde phase (en gris) est caractérisée par une déformation libre de dilatation ε^{00} . Dans le cas général, le vecteur de Burgers de la dislocation peut s'exprimer comme la somme d'une composante coin et d'une composante vis $b = b_s + b_e$. On note θ l'angle entre le vecteur de Burgers de la composante coin et l'axe x de l'interface. Le problème est invariant suivant z . Lorsque le champ de concentration atteint son équilibre, l'interface s'adapte au champ de contrainte de la dislocation comme représenté sur la figure 3.5.

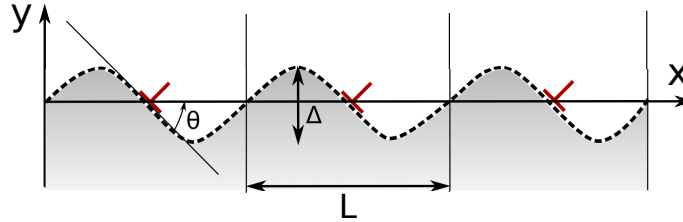


FIGURE 3.5 – Distribution périodique de dislocations le long d'une interface plane

La morphologie de l'interface peut être caractérisée grâce à une analyse du modèle champ de phase. On se place dans le cadre simplifié introduit dans la section 3.3.2 où la densité d'énergie libre chimique s'écrit sous la forme d'un simple polynôme d'ordre 4 :

$$f_{ch}(c) = \frac{16\Delta F}{(c_p - c_m)^4} (c - c_p)^2 (c - c_m)^2 \quad (3.23)$$

La densité d'énergie libre du système s'écrit comme la somme de cette énergie chimique, de l'énergie de gradient et de l'énergie élastique. On s'intéresse à la distribution du champs c à l'équilibre. La condition d'équilibre s'écrit en annulant la dérivée fonctionnelle de l'énergie libre totale par rapport à c :

$$\frac{\partial f_{ch}}{\partial c} - G \left(\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial f_{el}}{\partial c} = 0 \quad (3.24)$$

Le dernier terme issu de l'énergie élastique peut être développé :

$$\frac{\partial f_{el}}{\partial c} = - \frac{\sigma_{ij} \varepsilon_{ij}^{00}}{c_p} \quad (3.25)$$

4. Plus précisément, l'équilibre est défini par l'invariance spatiale du potentiel chimique $\mu(c)$. La situation considérée ici correspond à un précipité isolé dans une matrice infinie. Les champs de déformation élastique tendent donc vers 0 à l'infini. Le potentiel à l'infini se réduit donc à sa composante purement chimique, c'est-à-dire héritée de $f_{ch}(c)$. Ce potentiel ayant une tangente commune horizontale, le potentiel chimique d'équilibre est identiquement nul.

Le champ de contrainte peut se décomposer en une contribution issue des dislocations σ_{ij}^d et une contribution provenant du précipité de seconde phase σ_{ij}^p . On considère alors que les contraintes générées par le précipité sont négligeables comparées aux contraintes issues de la dislocation. Cette approximation est valable si $\varepsilon^{00} \ll b_e/r$ où r désigne la distance à la dislocation. On peut ainsi définir un rayon critique de l'ordre de $r_c = b_e/\varepsilon^{00}$ à l'intérieur duquel cette approximation est valable. On suppose que dans notre cas $r_c \gg L$, où L est la distance inter-dislocations. On suppose également que les déformations libres du précipité sont isotropes et diagonales ($\varepsilon_{ij}^{00} = \varepsilon^{00}\delta_{ij}$), ce qui est le cas pour les alliages Ni-Al et Al-Sc. Les contraintes interviennent dans la force motrice sous la forme d'une pression isostatique définie comme $p^d = -\frac{1}{3}(\sigma_{11}^d + \sigma_{22}^d + \sigma_{33}^d)$. On obtient finalement :

$$\frac{\partial f_{el}}{\partial c} = \frac{3\varepsilon^{00}}{c_p} p^d \quad (3.26)$$

On suppose également que l'influence des dislocations sur la morphologie de l'interface conduit à de petites perturbations. Dans le cadre de cette hypothèse, on peut considérer que le champ de concentration $c(x, y)$ solution de l'équation 3.24 garde la forme de la solution exacte du problème sans dislocations ni couplage élastique, notée $c_0(y)$, simplement translaté d'une quantité $f(x)$. La fonction $f(x)$ définit la perturbation de l'interface en x . Cette dernière hypothèse a le bon goût de simplifier l'équation 3.24 qui se réduit à⁵

$$G \frac{\partial^2 c_0(y - f(x))}{\partial x^2} = \frac{3\varepsilon^{00}}{c_p} p^d \quad (3.27)$$

Afin de faire apparaître une équation différentielle sur $f(x)$, on développe le terme de gauche et on intègre suivant la coordonnée y . Ces manipulations aboutissent à l'équation

$$G \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\{ (f'(x))^2 \frac{\partial^2 c_0}{\partial y^2} \frac{\partial c_0}{\partial y} - f''(x) \left(\frac{\partial c_0}{\partial y} \right)^2 \right\} = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\{ \frac{3\varepsilon^{00}}{c_p} p^d(x, y) \frac{\partial c_0}{\partial y} \right\} \quad (3.28)$$

Le premier terme du membre de gauche est nul du fait du caractère pair de $\frac{\partial c_0}{\partial y}$ et impair de $\frac{\partial^2 c_0}{\partial y^2}$. De plus, l'intégrale de $G \left(\frac{\partial c_0}{\partial y} \right)^2$ suivant y est simplement l'énergie d'interface. Enfin, le terme $\frac{\partial c_0}{\partial y}$ est localisé au niveau de l'interface et tend rapidement vers 0 dès qu'on s'en éloigne. Il est donc légitime de négliger la dépendance en y du champ de pression p^d de telle sorte que l'intégration du membre de droite devient élémentaire. L'équation 3.28 se résume finalement à :

$$E_{int} f''(x) = \frac{3\varepsilon^{00}}{c_p} (c_p - c_m) p^d(x) \quad (3.29)$$

La pression isostatique générée par un mur infini de dislocations le long de l'axe du mur (c'est-à-dire le long de x) peut être calculé à partir de la pression issue d'une dislocation isolée le long de cet axe qui s'écrit comme⁶ (Hirth 68) :

5. En l'absence d'interactions élastiques et de dislocations, le problème est invariant suivant x et la fonction $c_0(y)$ est solution de $\frac{\partial f_{ch}}{\partial c} = G \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}$ (équation 3.24 pour une interface plane en l'absence d'élasticité).

6. Le champ de pression issue d'une dislocation vis est nulle. Ainsi, seul le caractère coin de la dislocation joue un rôle.

$$p_0^d(x) = \frac{\mu b_e}{3\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{\sin \theta}{x} = \frac{\kappa}{x} \quad (3.30)$$

La pression issue du mur à une abscisse x s'écrit comme

$$p^d(x) = \frac{\kappa}{x} + \sum_{n=1}^{+\infty} \left\{ \frac{\kappa}{x-nL} + \frac{\kappa}{x+nL} \right\} \quad (3.31)$$

que l'on peut réécrire comme⁷ :

$$p^d(x) = \frac{\kappa\pi}{L \tan(\pi x/L)} \quad (3.32)$$

Finalement l'équation 3.29 prend la forme :

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{A\pi}{L \tan(\pi x/L)} \quad \text{avec} \quad A = \frac{\varepsilon^{00}}{E_{int}} \frac{\mu b_e}{\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \sin \theta \left(1 - \frac{c_m}{c_p} \right) \quad (3.33)$$

Le coefficient A est un nombre sans dimension qui fait émerger une compétition entre une énergie par unité de surface de nature mécanique $\varepsilon^{00}\mu b_e$ et l'énergie d'interface E_{int} . Ce rapport pilote l'amplitude de la perturbation $f(x)$.

- si $\varepsilon^{00}\mu b_e \gg E_{int}$, $A \gg 1$ et la perturbation de l'interface est importante
- à l'inverse, si $E_{int} \gg \varepsilon^{00}\mu b_e$, la perturbation est faible.

On peut également remarquer la dépendance de A en $\sin \theta$. Ainsi, si le vecteur de Burgers de la composante coin b_e est perpendiculaire à la normale à la surface ($\theta = 0$), la dislocation relaxe les déformations dues au désaccord paramétrique et aucune modification de la morphologie n'apparaît. Au contraire, si $\theta = \frac{\pi}{2}$, le champ de contrainte de la dislocation ne relaxe pas les contraintes de misfit et le système minimise son énergie en modifiant la morphologie de l'interface.

On cherche maintenant à déterminer la fonction $f(x)$ solution de l'équation 3.33. La première intégration donne :

$$\frac{\partial f}{\partial x} = A \ln \left| \sin \left(\frac{\pi x}{L} \right) \right| + C_1 \quad (3.34)$$

La seconde intégration peut être déterminée analytiquement mais conduit à une expression difficile à interpréter faisant intervenir la fonction dilogarithme. Pour obtenir une expression approchée de $f(x)$, on considère que dans l'intervalle d'intérêt $[-L/2, L/2]$, $\sin \left(\frac{\pi x}{L} \right) = \frac{\pi x}{L} - \frac{\pi^3 x^3}{6L^3} + O(x^5)$. En effectuant un développement limité du logarithme, on obtient finalement :

$$\frac{\partial f}{\partial x} = A \ln \left| \frac{\pi x}{L} \right| - \frac{A\pi^2 x^2}{6L^2} + C_1 \quad (3.35)$$

On peut alors aisément réaliser l'intégration. Afin de déterminer les conditions aux limites, on remarque tout d'abord que la forme de l'équation 3.34 indique que la solution $f(x)$ est antisymétrique. On suppose également que la position moyenne de l'interface est nulle ($\int f(x)dx = 0$). Enfin, on considère que la solution doit respecter la périodicité imposée par le mur de dislocations, c'est-à-dire $f(L/2) = f(-L/2)$. Ces contraintes sur la solution $f(x)$ se traduisent par les conditions aux limites $f(0) = f(L/2) = f(-L/2) = 0$. Après intégration de l'équation simplifiée et détermination des constantes d'intégration, on obtient :

7. en utilisant la relation $\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{a}{a^2-n^2} = -\frac{1}{2a} + \frac{\pi}{2 \tan(\pi a)}$

$$f(x) = Ax \ln \left| \frac{2x}{L} \right| + \frac{A\pi^2 x}{72} \left(1 - \frac{4x^2}{L^2} \right) \quad (3.36)$$

On peut alors aisément déterminer l'amplitude de la perturbation notée Δ (figure 3.5) en déterminant numériquement les maxima de cette fonction.

3.4.3 Comparaison avec les observations expérimentales de l'alliage CMSX-4

On peut directement comparer la solution obtenue dans le paragraphe précédent avec les observations expérimentales réalisées sur l'alliage à base nickel CMSX-4 (figure 3.4.b). La distance moyenne entre dislocations est de l'ordre de $L \simeq 13$ nm et l'amplitude moyenne des perturbations est $\Delta_{exp} = 3.5$ nm.

La normale à l'image est la directions $[1\bar{1}0]$. Les dislocations d'interface sont de type $\frac{a}{2}[011]$ et ont un caractère mixte avec $b_e = 0.22$ nm et $b_s = 0.125$ nm. L'angle entre le plan de glissement et la direction de l'interface est $\theta = \arccos(1/\sqrt{3}) \simeq 55^\circ$.

a (Völkl 98)	μ (Siebörger 01)	ν (Siebörger 01)	E_{int} (Sonderegger 09)	ε^{00} (Völkl 98)
0.36 nm	115 GPa	0.4	10 – 50 mJ/m ²	$-2 \cdot 10^{-3}$

TABLE 3.2 – Données de l'alliage à base nickel CMSX-4 à 750 K

Les grandeurs physiques caractéristiques de l'alliage CMSX-4 sont répertoriées dans le tableau 3.2. L'énergie d'interface présente une grande dispersion (voir par exemple (Sonderegger 09)), variant d'un facteur 5 d'une référence à l'autre. On déduit de ces grandeurs une perturbation de l'interface dont l'amplitude varie entre 1,76 nm et 5,06 nm, valeurs qui encadrent très bien celle déterminée à partir de l'observation. Ainsi, malgré les simplifications sur lesquelles repose la solution 3.36, celle-ci donne le bon ordre de grandeur pour ces perturbations.

3.4.4 Simulations champ de phase

Le modèle proposé dans la section 3.3 permet d'étudier la modification de la morphologie due à la présence de dislocations. Pour se placer dans des conditions proches de celles utilisées dans la solution analytique, on suppose les constantes élastiques des deux phases identiques.

Cas $\theta = 90^\circ$

On s'intéresse tout d'abord au cas où l'interface et le plan de glissement des dislocations sont orthogonaux. On considère un système périodique de dimensions $36,48 \times 36,48$ nm². Un précipité lamellaire et un dipôle de dislocations sont introduits au centre de la simulation. Même si les dislocations peuvent sembler très proches l'une de l'autre, la contrainte effective agissant sur chaque dislocation est nulle étant donnée la périodicité du système. Au cours de la simulation, on impose une contrainte moyenne nulle. On peut noter tout d'abord que l'élasticité modifie légèrement les concentrations à l'équilibre des deux phases (Boussinot 07), ce qui dans notre cas, a peu d'influence.

L'allure de l'interface à l'équilibre est représentée sur la figure 3.6.a. On remarque que l'on trouve un bon accord entre le modèle champ de phase et la solution analytique malgré les approximations sur lesquelles repose cette dernière. La figure 3.6.b représente l'amplitude de la perturbation en fonction de l'énergie d'interface. On peut noter que la solution analytique surestime systématiquement l'amplitude de la perturbation.

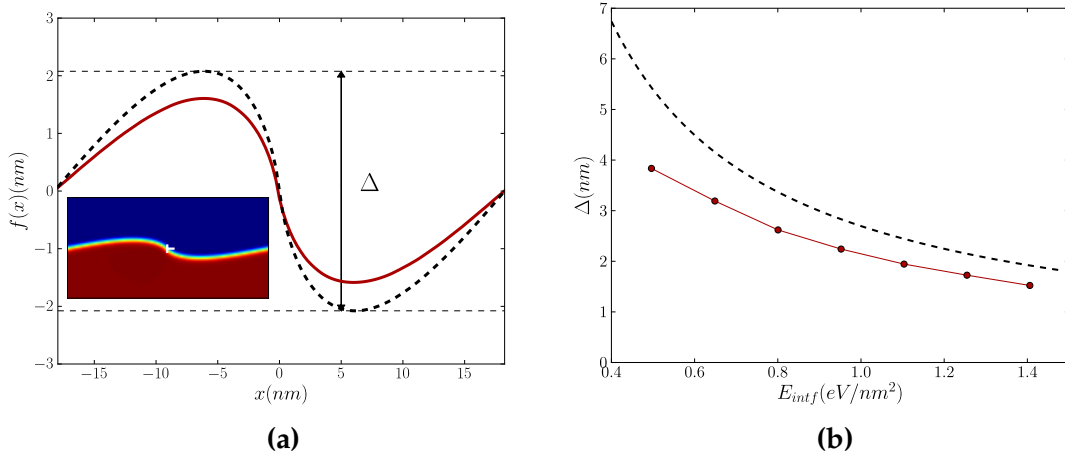


FIGURE 3.6 – (a) Morphologie de l'interface obtenue par simulation champ de phase (rouge) et comparaison avec la solution analytique de l'équation 3.36 (pointillés noirs) pour $E_{int} = 0,65 \text{ eV/nm}^2$. L'encart montre une visualisation de la simulation champ de phase. (b) Amplitude de la perturbation Δ en fonction de l'énergie d'interface prédit par la solution analytique (pointillés noirs) et par les simulations champ de phase (rouge).

Contrairement aux simulations champ de phase, la solution analytique suppose que le champ de concentration s'écrit comme une fonction c_0 traduite (où c_0 est la structure de l'interface sans dislocation ni couplage élastique). Néanmoins, pour les fortes perturbations, c'est-à-dire pour les E_{int} faibles, on s'éloigne de cette hypothèse, en particulier proche du cœur de la dislocation. De plus, afin d'intégrer le membre de droite de l'équation 3.28, on a négligé la dépendance du champ de pression de la dislocation suivant y , ce qui revient à surestimer cette intégrale et donc le facteur A qui pilote l'amplitude de la perturbation.

La modification de l'interface introduit un couplage entre la dislocation et la microstructure. Ce couplage épingle la dislocation au niveau de l'interface et une contrainte seuil σ_{th} est nécessaire pour séparer la dislocation de l'interface. Afin de limiter autant que possible la contribution de la contrainte de Peierls à l'épingle, on choisit le paramètre $\alpha = -0.3$ pour lequel la contrainte issue de la friction de réseau est inférieure à 1 MPa. Des simulations à contrainte imposée fixe permettent dès lors de déduire cette contrainte seuil. Comme attendu, cette contrainte décroît lorsque l'énergie d'interface augmente, et varie de 164 MPa pour une énergie d'interface de 0.51 eV/nm^2 à 63 MPa pour une énergie d'interface de 1.43 eV/nm^2 . Ainsi, même dans le cas d'une faible modification de la morphologie d'interface, cette contrainte est du même ordre de grandeur que la contrainte de Peierls (35 – 256 MPa suivant le caractère de la dislocation (Lu 01)).

Cas $\theta = 55^\circ$

On a vu que, lors de leur croissance, les précipités Al_3Sc adoptent une morphologie légèrement cuboïdale pour laquelle les faces sont orientées dans les directions cristallographiques de type $[100]$. On peut s'intéresser à une boucle de cisaillement entourant le précipité cuboïdal (voir figure 3.7). Sur la face de normale $[001]$, la dislocation possède un caractère vis et a donc peu d'influence sur la morphologie de l'interface. Toutefois, sur les surfaces de normales $[100]$ et $[010]$ qui sont équivalentes, la dislocation possède un caractère mixte dont la composante coin peut avoir une influence significative sur la morphologie. On s'intéresse particulièrement à la surface de normale $[100]$ pour laquelle la direction de la ligne de dislocation est $\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}[011]$ et le vecteur de Burgers

$b = \frac{a}{2}[110]$ se décompose en une composante coin de norme $b\frac{\sqrt{3}}{2}$ et une composante vis de norme $b_s = \frac{b}{2}$. L'angle entre la direction de glissement des dislocations et la direction de l'interface est $\theta = \arccos(1/\sqrt{3}) \simeq 55^\circ$.

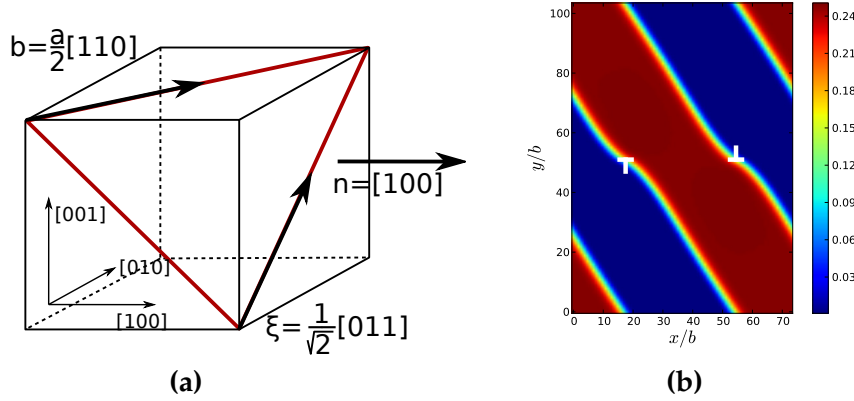


FIGURE 3.7 – (a) Précipité cuboïdal entouré d'une boucle d'Orowan (en rouge). (b) Simulation champ de phase 2D représentative d'une telle configuration.

Afin de simuler une telle configuration, on se place dans le repère dont les directions y et z sont orientées respectivement suivant la normale au plan de glissement et la direction de la ligne ξ . Les dimensions de la simulation sont choisies afin de conserver la bonne orientation entre l'interface et la normale au plan de glissement et d'être compatible avec les conditions aux limites périodiques. La longueur de l'interface est maintenue à 36,48 nm comme dans le paragraphe précédent. La figure 3.7 représente le résultat d'une simulation champ de phase effectuée avec cette géométrie.

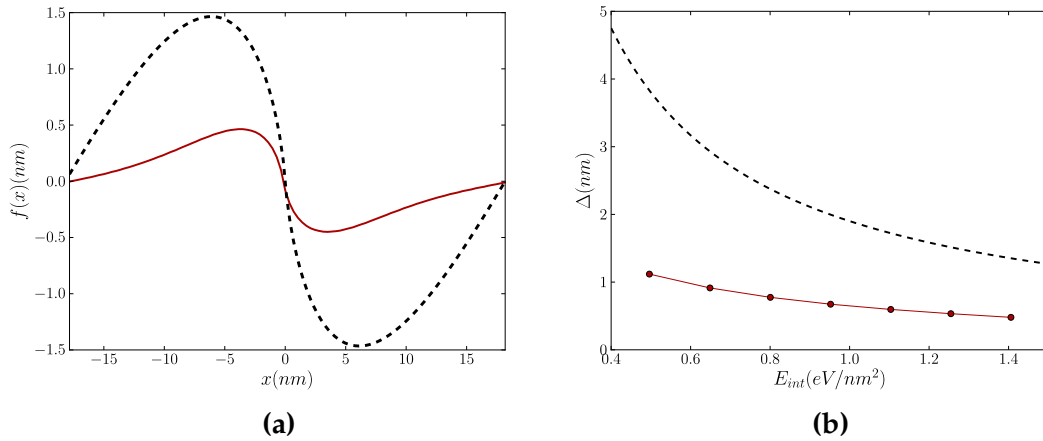


FIGURE 3.8 – (a) Morphologie de l'interface obtenue par simulation champ de phase (rouge) et comparaison avec la solution analytique de l'équation 3.36 (pointillés noirs) pour $E_{int} = 0,65$ eV/nm². (b) Amplitude de la perturbation Δ en fonction de l'énergie d'interface prédite par la solution analytique (pointillés noirs) et par les simulations champ de phase (rouge).

Comme précédemment, on compare la morphologie à l'équilibre des simulations champ de phase à la solution analytique proposée dans la section 3.4.2. La figure 3.8.a présente la morphologie obtenue par les deux approches. On remarque que la perturbation prévue par la solution numérique est significativement plus faible que celle de la solution analytique. Comme dans le paragraphe précédent, ceci peut être attribué aux approximations sur lesquelles repose l'approche analytique. De plus, dans ce cas, les dimensions de la simulation champ de phase sont relativement réduites et le système

contient un dipôle de dislocations. En conséquence, l'influence de la dislocation "de gauche" sur l'interface "de droite" est loin d'être négligeable. Du fait du signe opposé des dislocations, la contrainte subie par chaque interface est réduite comparée à la solution analytique où on considère une interface isolée. Cet artefact est réduit lorsqu'on augmente les dimensions de la simulation.

3.5 Interaction entre une boucle d'Orowan et un précipité sphérique

Au cours de leur croissance, les précipités Al_3Sc présentent une morphologie sphérique lorsqu'ils sont suffisamment petits (Seidman 02, Watanabe 04). Dans cette section, on s'intéresse aux interactions entre une boucle d'Orowan et un précipité sphérique de rayon 9.12 nm placé au centre d'un système périodique de dimensions $36.48 \times 36.48 \times 36.48 \text{ nm}^3$. On se place dans le cadre de l'élasticité inhomogène où les constantes élastiques du précipité sont plus importantes que celle de la matrice. On peut noter que l'élasticité ainsi que la courbure de l'interface sphérique modifie les concentrations à l'équilibre du précipité et de la matrice (Boussinot 07).

On suppose que, lors d'une déformation antérieure, une dislocation a contourné le précipité par un mécanisme d'Orowan, laissant une boucle de dislocation sur l'équateur du précipité (voir figure 3.9.a). La simulation est orientée de telle sorte que le vecteur de Burgers et la normale au plan de glissement de la boucle soient respectivement orientés suivant les directions x et z .

Des tests préliminaires ont montré que le coût de calcul d'une telle simulation 3D est prohibitif si on conserve le critère d'arrêt de l'équilibre élastique à $\varepsilon_{th} = 10^{-6} b/d$. On augmente donc le critère d'arrêt à $\varepsilon_{th} = 10^{-5} b/d$. Nous avons vérifié que ce choix ne modifie pas significativement les résultats obtenus aux premiers instants de la simulation.

La configuration d'équilibre est fonction d'une compétition entre deux forces d'origine différentes, une force chimique qui tend à minimiser l'énergie d'interface du précipité et une force mécanique qui tend à contracter la boucle d'Orowan. La figure 3.9.a représente l'état d'équilibre du système. On peut tout d'abord noter que la boucle d'Orowan influence la morphologie d'équilibre du précipité qui s'éloigne significativement de sa forme sphérique. Cette évolution morphologique est davantage mise en évidence sur les coupes représentées sur les figures 3.9.c et 3.9.d. Sur la coupe effectuée dans le plan $x = 0$ (figure 3.9.c), les dislocations ont un caractère vis et leur champ de contrainte n'influence pas significativement la morphologie du précipité, qui est caractérisé par une déformation libre de compression. On peut toutefois remarquer que, du fait de la tension de ligne de la boucle, celle-ci "creuse" l'interface du précipité. La coupe de la figure 3.9.d effectuée dans le plan $y = 0$ montre que les composantes coin de la boucle de dislocation influencent davantage la morphologie du précipité qui s'adapte au champ de contrainte de la dislocation.

Outre l'influence de la dislocation sur la morphologie du précipité, on peut également s'intéresser à la modification de la boucle d'Orowan au long de la simulation. Au cours de la simulation, l'évolution microstructurale conduit à une modification du précipité permettant la contraction de la boucle d'Orowan et la réduction de l'énergie qui y est associée. La figure 3.9.b montre également que la boucle se contracte davantage au niveau des parties coin que des parties vis.

On peut s'interroger sur l'existence et la possible observation de telles modifications morphologiques des précipités Al_3Sc . Aux températures où l'évolution microstructurale est activée, la montée des dislocations est également active. Ainsi, il est probable que les

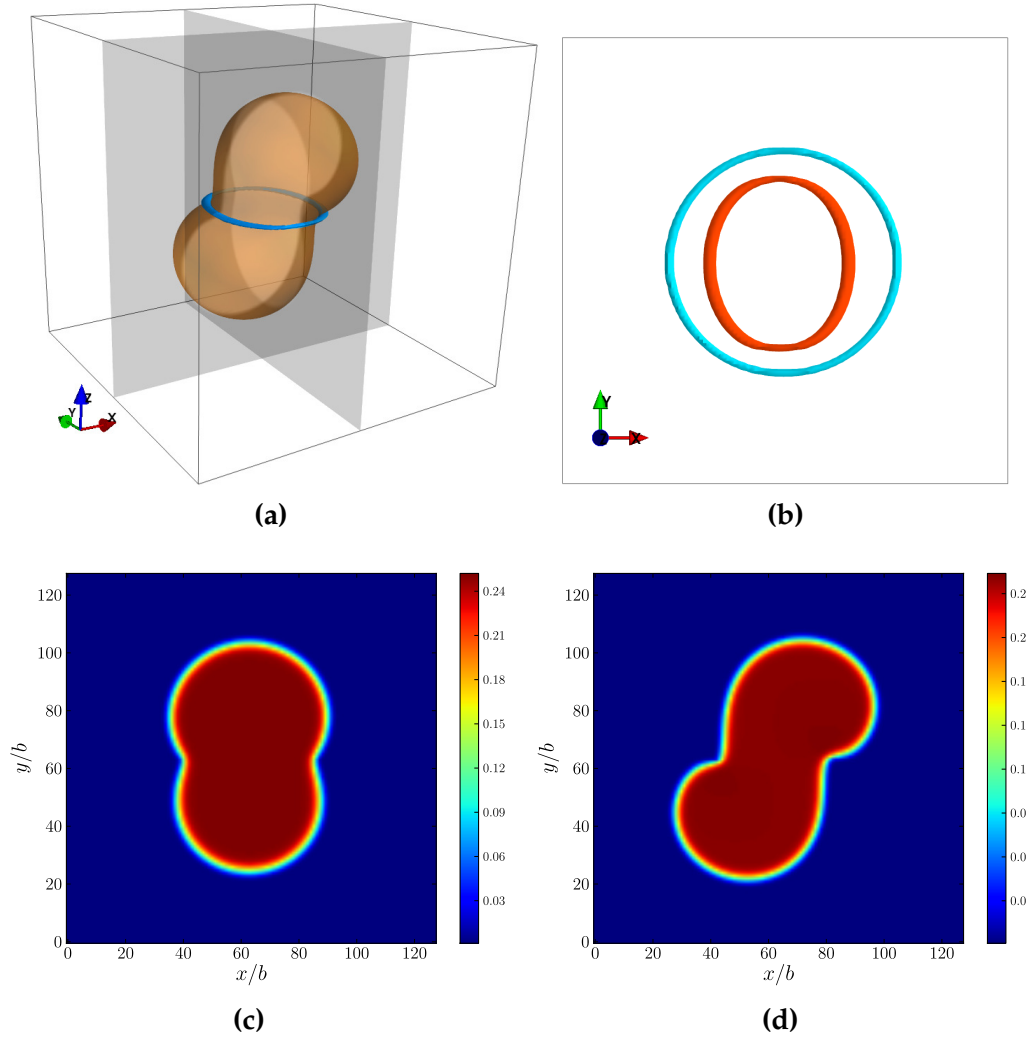


FIGURE 3.9 – (a) Morphologie d'équilibre d'un précipité initialement sphérique entouré d'une boucle d'Orowan (précipité en rouge transparent et boucle de dislocation en bleu clair). (b) Evolution de la boucle d'Orowan entre la condition initiale (bleu) et la configuration d'équilibre (rouge). (c,d) Coupes représentant le champ de concentration dans les plans $x = 0$ (c) et $y = 0$ (d)

parties coin de la boucle d'Orowan montent le long du précipité et s'annihilent avant d'induire une modification morphologique observable.

3.6 Influence d'une dislocation sur la mobilité d'une interface

Dans cette section, on s'attache à étudier l'influence des dislocations sur la cinétique d'avancée d'une interface en présence d'une sursaturation. Par simplicité on considère le cas d'une interface initialement plane et d'une dislocation coin dont le vecteur de Burgers est orienté suivant la normale à l'interface (cas $\theta = 90^\circ$ vu dans la section 3.4.4). Par simplicité, on considère les constantes élastiques homogènes égales à celle de l'aluminium. La sursaturation est fixée à 2 fois la concentration d'équilibre de la matrice, soit 0.18 %. Ceci correspond à la situation physique d'une trempe d'une température $T = 930$ K à $T = 800$ K.

On considère tout d'abord le cas d'une interface plane sans dislocation. Soit un système périodique allongé de dimensions 145.92×18.24 nm² où on introduit un précipité lamellaire suivant la direction y (voir encart de la figure 3.10). Pour se rapprocher du cas

limite d'une matrice infinie, la concentration en $x = L_x$ est maintenue à 0.18 % au cours de la simulation. Sous l'effet de la sursaturation, l'interface avance progressivement vers les $x > 0$ en diminuant sa vitesse (courbe bleue sur la figure 3.10).

Le comportement de la position de l'interface en fonction du temps peut être retrouvé analytiquement en considérant que la concentration du précipité reste constante égale à c_p et que la concentration en soluté suit la loi de Fick unidimensionnelle dans la matrice :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (3.37)$$

En posant le changement de variable $\xi = x/2\sqrt{Dt}$ et en notant $f = \partial c / \partial \xi$, on obtient l'équation différentielle :

$$\frac{\partial f}{\partial \xi} = -2\xi f(\xi) \quad (3.38)$$

qui admet des solutions du type :

$$f(\xi) = \alpha \exp(-\xi^2) \quad (3.39)$$

On trouve alors $c(\xi)$ par simple intégration :

$$c(\xi) = c(\xi = +\infty) + \alpha \int_{+\infty}^{\xi} \exp(-\xi^2) d\xi \quad (3.40)$$

$$= c(\xi = +\infty) - \frac{\alpha\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erfc}(\xi) \quad (3.41)$$

où erfc est la fonction erreur complémentaire. On considère alors que quel que soit le temps considéré, la concentration en $x = +\infty$ est maintenue à c_∞ (sursaturation), c'est-à-dire $c(\xi = +\infty) = c_\infty$. De plus, on peut considérer que l'avancée de l'interface est négligeable comparée à la longueur de diffusion. Cette hypothèse est légitime dans le cas des faibles sursaturations comme considérées ici⁸. On suppose également que l'interface reste localement à l'équilibre, on a donc à tout instant $c(x = 0^+) = c_m$. Cette condition permet de déterminer le coefficient α et d'obtenir :

$$c(\xi) = c_\infty - (c_\infty - c_m) \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \quad (3.42)$$

La vitesse de l'interface est obtenue à partir du flux de soluté arrivant en $x = 0$:

$$v = \frac{D}{c_p - c_m} \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=0} = \sqrt{\frac{D}{\pi t}} \frac{c_\infty - c_m}{c_p - c_m} \quad (3.43)$$

En intégrant, on trouve la position de l'interface au cours du temps :

$$x(t) = 2\sqrt{\frac{Dt}{\pi}} \frac{c_\infty - c_m}{c_p - c_m} \quad (3.44)$$

8. On peut se passer de cette hypothèse et mener le calcul à bien grâce à la détermination numérique du zéro d'une fonction (Sekerka 75). Dans le cas d'une très faible sursaturation, la solution exacte est très proche de l'approche analytique simple proposée ici (on trouve une différence inférieure à 1% sur la position de l'interface pour nos paramètres)

Cette solution analytique est tracée en pointillés noirs sur la figure 3.10. Bien que la solution analytique prédit le bon comportement et le bon ordre de grandeur pour l'avancée de l'interface au cours du temps, la différence avec la courbe déterminée numériquement est de l'ordre de 15%. Cette différence provient du fait que la solution analytique est obtenue en supposant que le champ de concentration suit la loi de Fick. Or, le modèle décrit dans la section 3.3 est paramétré de telle sorte que la loi de Fick soit retrouvée uniquement dans le cas d'une concentration en solutés très faible pour laquelle les termes polynomiaux de l'énergie libre (équation 3.4) deviennent négligeables comparés à la contribution logarithmique. Dans le cas considéré ici, la concentration dans la matrice est comprise entre c_m et $2c_m$, un domaine dans lequel les termes polynomiaux sont loin d'être négligeables et où la concentration en soluté ne suit donc pas exactement la loi de Fick.

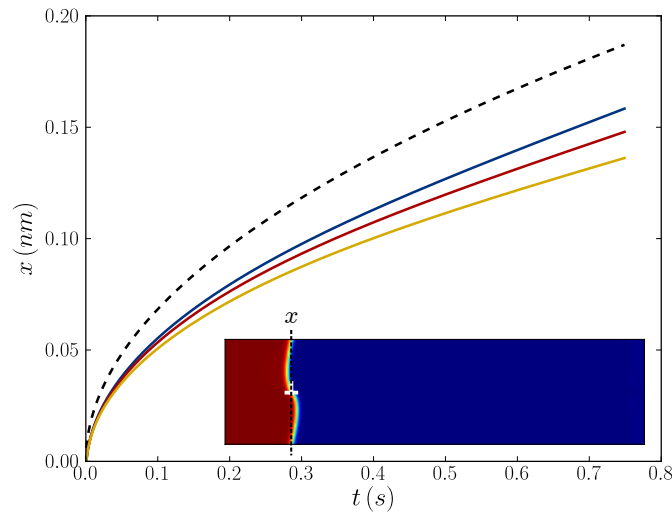


FIGURE 3.10 – Position de l'interface en fonction du temps. Solution analytique de l'équation 3.44 (pointillés noirs), solution numérique sans dislocation (bleu), en présence d'une dislocation d'interface (rouge) et en présence d'une contrainte appliquée $\sigma^a = -200$ MPa (jaune).

Afin de mesurer l'influence d'une dislocation à l'interface sur la vitesse d'avancée de celle-ci, une simulation identique est réalisée en introduisant une dislocation. Avant d'appliquer la sursaturation, on laisse relaxer le système de telle sorte que la morphologie de l'interface soit modifiée par la présence de la dislocation (voir encart de la figure 3.10). On peut faire remarquer que, au cours de l'avancée de l'interface, l'énergie de paroi d'antiphase empêche la dislocation de pénétrer dans le précipité. La position moyenne de l'interface au cours du temps est représentée en rouge sur la figure 3.10. On peut noter que la présence d'une dislocation d'interface freine légèrement l'avancée de celle-ci dont la vitesse est diminuée d'environ 5%. L'apparition d'une courbure de l'interface modifie localement les concentrations d'équilibre des deux phases, ce qui conduit à une modification du champ de concentration dans la matrice. La modification de la morphologie de l'interface induit donc une perturbation du champ de concentration, ce qui peut provoquer un ralentissement de la cinétique d'avancée de l'interface.

Afin de se rapprocher d'une situation de fluage, une autre simulation a été effectuée en appliquant une contrainte de cisaillement de $\sigma^a = -200$ MPa au système. La cinétique de l'interface au cours du temps est représentée sur la courbe jaune sur la figure 3.10. On remarque que la présence d'une contrainte de cisaillement diminue la vitesse d'avancée de l'interface. Toutefois, ce ralentissement reste relativement faible (environ 5%) dans le cas présent. Une fois encore, ce ralentissement peut être attribué à la

complexité du champ de diffusion à proximité de l'interface dont la morphologie a été modifiée par la contrainte appliquée.

Les simulations numériques présentées dans cette section montrent que la présence d'une dislocation et d'une éventuelle contrainte appliquée modifie légèrement la cinétique d'avancée d'une interface. Ces résultats peuvent sembler en contradiction avec les observations expérimentales d'Iwamura et al. qui indiquent que la perte de cohérence des précipités d' Al_3Sc a tendance à accélérer leur cinétique de mûrissement (Iwamura 04). Ce type de cinétique est cependant éloigné du cas de l'avancée d'une interface plane dans une matrice sursaturée. Comme indiqué dans (Iwamura 04), la perte de cohérence des précipités peut s'interpréter comme une augmentation de leur énergie d'interface. Cet effet conduit à une accélération du mûrissement d'Ostwald dont la cinétique est proportionnelle à l'énergie d'interface (Lifshitz 61).

Un lien peut être établi entre cette étude et la question de l'héritage de la déformation plastique soulevée dans la thèse de Maeva Cottura (Cottura 13) où la plasticité est traitée par des modèles continus. Dans le cas où la plasticité est couplée à un modèle de champ de phase tenant compte de l'évolution microstructurale, l'interface du précipité peut avancer dans une matrice préalablement déformée plastiquement. On peut alors s'interroger sur l'héritage de cette déformation plastique par la nouvelle phase. La situation considérée dans ce paragraphe constitue un cas particulier où la déformation plastique de la matrice a été provoquée par une dislocation qui vient décorer l'interface. Dans nos simulations, la dislocation et l'interface avancent ensemble, ce qui correspond au cas où la seconde phase n'hérite pas de déformation plastique. Dans le cas de l'alliage Al-Sc, l'énergie de paroi d'antiphase empêche la dislocation de pénétrer dans l'interface et une contrainte colossale de l'ordre de 1.7 GPa doit être appliquée à la dislocation pour la voir pénétrer dans le précipité. Ainsi, dans le cas de l'alliage Al-Sc, on peut affirmer que les dislocations restent à l'interface précipité/matrice lors de la croissance du précipité. Ce résultat peut être généralisé aux alliages Ni-Al qui présentent également une énergie de paroi d'antiphase élevée.

3.7 Perspective d'application : hydrures dans le zirconium

L'utilisation des alliages de zirconium dans l'industrie nucléaire provoque leur exposition à des conditions de température et d'oxydation sévères. Ces conditions d'utilisation conduisent à la précipitation d'hydrures, à l'origine d'une fragilisation de ces alliages.

Le diagramme de phase du système ZrH fait apparaître de nombreux types d'hydrures possédant des composition en hydrogène différentes (Gibbs 67). Les phases apparaissant lors des premiers stades de précipitation sont les suivantes :

- Une phase tétragonale de composition Zr_2H , baptisée phase ζ , a été mise en évidence récemment (Zhao 08a, Zhao 08b). Elle apparaît sous la forme de précipités aciculaires, cohérents avec la matrice, alignés suivant les directions $[1\bar{1}20]$ et pouvant atteindre 500 nm de long. La force motrice expliquant un tel alignement est d'origine élastique et provient de l'inhomogénéité des constantes élastiques entre l'hydrure et la matrice (Thuinet 12b).
- Pour les plus grands précipités, une phase dénommée γ de composition ZrH possédant une structure tétragonale face centrée a été observée expérimentalement (Bailey 63, Carpenter 78b). Tout comme la phase ζ , elle adopte une morphologie en aiguille suivant les directions denses du plan basal. Bien qu'elle possède une structure différente de celle de la matrice hexagonale compacte, les plans denses des hydrures $[111]$ sont alignés avec ceux de la matrice $[0001]$. Cette phase s'ac-

compagne de l'apparition d'un réseau régulier de dislocations (voir figure 3.11.a) (Bailey 63, Carpenter 78b, Carpenter 73). Pour des précipités plus larges, le réseau de dislocations devient enchevêtré et on peut observer l'émission de boucles prismatiques (Bailey 63, Carpenter 78a).

Carpenter (Carpenter 78b) avait supputé l'existence d'une phase métastable, cohérente avec la matrice, jouant le rôle de précurseur aux précipités γ . Thuinet et al. (Thuinet 12a) ont montré que la phase ζ constituait un candidat idéal pour ce rôle de précurseur. Le mécanisme proposé par Carpenter (Carpenter 78b) peut alors s'appliquer à la transition $\zeta \rightarrow \gamma$. Il suppose que les contraintes générées autour du précurseur sont suffisamment importantes pour nucléer des dislocations de cisaillement dans le plan basal. La transition d'un empilement de type ABABAB (phase ζ) vers un empilement de type ABCABC (phase γ) se fait par le passage d'une partielle de type $\frac{a}{3}[10\bar{1}0]$ dans des plans basaux alternés (voir figure 3.11). Les partielles restent à l'interface précipité/matrice et relaxent les champs de contrainte du précipité. Carpenter (Carpenter 78b) a vérifié que la structure des dislocations observée autour des précipités est bien cohérente avec ce mécanisme (Carpenter 78b).

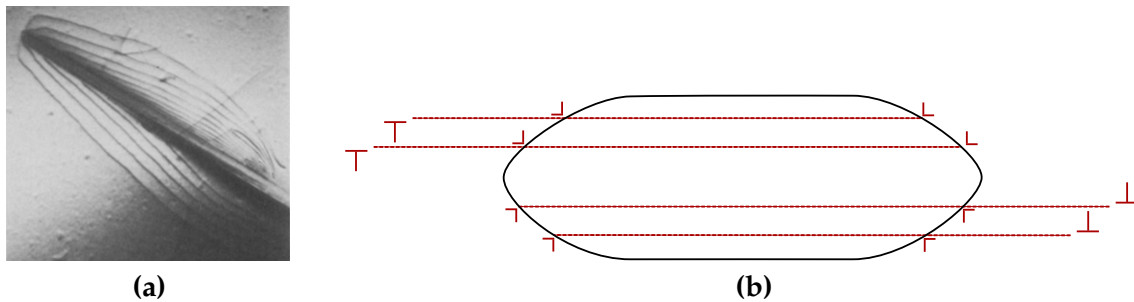


FIGURE 3.11 – (a) Réseau de dislocations autour d'un hydrure dans le zirconium (Carpenter 78a). (b) Mécanisme de la transformation $\zeta \rightarrow \gamma$ au moyen du passage de partielle de type $\frac{a}{3}[10\bar{1}0]$.

Même si le mécanisme proposé par Carpenter permet d'expliquer la transition structurale, il ne tient pas compte de l'évolution de la composition en hydrogène dans le précipité qui passe d'une composition Zr_2H à ZrH . On peut ainsi se demander si c'est la modification de la concentration en H qui provoque le changement structural ou l'inverse, c'est-à-dire la nucléation de dislocations et le changement de structure qui initie le changement de composition.

Le modèle proposé dans le chapitre 1 couplé avec un modèle de champ de phase tenant compte de l'évolution microstructurale, comme proposé dans ce chapitre, apparaît comme un outil de choix pour l'étude de la transition de phase $\zeta \rightarrow \gamma$. En effet, ce modèle tient compte naturellement de la nucléation des dislocations. De plus, son caractère variationnel permet un couplage direct avec un modèle de champ de phase tenant compte du changement de concentration et de la diffusion des atomes d'hydrogène au cours de la transition. En plus des grandeurs caractéristiques des différentes phases (constantes élastiques, paramètres de maille, énergie libre de formation) qui ont déjà été déterminées par des techniques *ab initio* (Thuinet 12a), la détermination de γ -surfaces serait nécessaire pour mener à bien de tels calculs.

3.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons développé un couplage entre le modèle d'élasticité périodique proposé dans le chapitre 1 et l'évolution microstructurale des précipités Al_3Sc dans l'alliage Al-Sc. Un tel modèle permet de simuler les interactions complexes entre

microstructure en évolution et dislocations d'interface. Dans un premier temps, nous nous sommes intéressés à l'influence des dislocations sur la morphologie d'une interface plane. Nous avons proposé un modèle analytique simple permettant de quantifier l'ordre de grandeur de la perturbation de l'interface induite par le champ de contrainte des dislocations. Les simulations champ de phase conduisent à des résultats comparables.

Nous avons ensuite étudié l'influence d'une boucle d'Orowan sur la morphologie d'un précipité initialement sphérique. Le système minimise son énergie en modifiant la morphologie du précipité pour s'adapter aux champs de contraintes de la dislocation.

Nous nous sommes enfin penchés sur l'influence des dislocations sur la cinétique d'avancée d'une interface dans le cas d'une sursaturation en soluté dans la matrice. Nous avons montré que la présence d'une dislocation et d'une éventuelle contrainte appliquée influence légèrement la cinétique de croissance.

Une amélioration du modèle proposée dans ce chapitre consiste à perfectionner la résolution de l'équilibre mécanique. En effet, la dynamique dissipative utilisée ici est loin d'être une méthode numérique efficace pour résoudre l'équilibre élastique, ce qui rend la réalisation de simulations 3D longue et gourmande en ressources. Des techniques de minimisation de type descente du gradient ou méthode de Newton-Raphson, beaucoup plus efficaces, permettraient de réduire significativement les temps de calcul et de réaliser des simulations 3D en des temps raisonnables.

Une des perspectives d'application de ce type de modèle pourrait être l'étude de la précipitation des hydrides de Zirconium. En effet, au cours de cette précipitation, une transition entre deux phases s'effectue grâce à la nucléation de dislocations d'interface ainsi que la diffusion d'atomes d'hydrogène. Le modèle proposé ici tenant compte de la diffusion d'atomes de soluté ainsi que de la nucléation de dislocations d'interface, il apparaît comme un outil de choix pour l'étude de ce type de transition de phase complexe.

La précipitation d'hydrides s'effectue sur des échelles de temps très courtes même à des températures faibles étant donné le coefficient de diffusion élevé de l'hydrogène dans la matrice de zirconium. Ainsi, la montée des dislocations n'est pas activée, ce qui facilite l'étude des mécanismes intervenant lors de cette transition de phase. Toutefois, cette situation constitue davantage une exception qu'une règle générale car la diffusion des solutés s'effectue souvent par des mécanismes lacunaires. C'est le cas des alliages Al-Sc dans lequel la diffusion des lacunes est également active aux températures où la microstructure est en évolution. Ainsi, la montée des dislocations peut jouer un rôle fondamental dans les interactions entre dislocations et précipités de seconde phase.

MODÈLE CHAMP DE PHASE POUR LA MONTÉE DES DISLOCATIONS

4

Dans le chapitre 3, nous avons vu que les dislocations peuvent modifier la structure de l'interface précipité/matrice ainsi que la cinétique de croissance des précipités. Sur les échelles de temps et aux températures où les précipités évoluent, les mécanismes de montée des dislocations par émission/absorption de lacunes sont également activés. Dans les alliages microstructurés tels que les alliages d'aluminium ou les superalliages base nickel, le franchissement des obstacles par les dislocations est facilité par ces processus de montée. Ainsi, la montée des dislocations est un ingrédient important du comportement plastique de ce type d'alliage.

Dans un premier temps, nous présentons dans la section 4.1 les différentes approches - analytiques et numériques - de l'étude de la montée des dislocations, leurs avantages ainsi que leurs faiblesses. Dans la section 4.2, nous proposons un modèle champ de phase permettant d'étudier la montée des dislocations. Cette technique est particulièrement adaptée à ce problème car elle permet de prendre naturellement en compte la diffusion des lacunes, leur dynamique hors-équilibre ainsi que les interactions élastiques entre défauts ponctuels et dislocations. Nous présentons ensuite les résultats numériques issus de nos simulations. Nous étudions le cas simple d'une dislocation isolée (section 4.3), puis nous nous attachons à étudier l'influence des interactions élastiques entre lacunes et dislocations (section 4.3). Enfin, des configurations plus complexes impliquant plusieurs dislocations sont étudiées (section 4.5).

4.1 Les différentes approches de la montée des dislocations

Du fait de son importance pour l'étude de la déformation plastique des métaux à haute température, la montée des dislocations est un sujet largement discuté dans la littérature. Sous certaines hypothèses, la vitesse de montée peut être facilement calculée. Les sections 4.1.1 et 4.1.2 présentent les approches analytiques permettant d'obtenir la vitesse de montée dans les cas où la ligne de dislocation se comporte comme un puits/une source parfaite de lacunes et dans le cas où les lacunes sont absorbées/émises au niveau de crans répartis le long de la ligne. Nous verrons ensuite dans la section 4.1.3 le succès relatif de ces modèles simples à reproduire les résultats expérimentaux. Enfin, nous verrons dans la partie 4.1.4 que les moyens de calculs actuels ouvrent la possibilité à des études plus complètes de la montée des dislocations.

4.1.1 Calcul de la vitesse de montée dans un cas simple

La montée des dislocations s'effectue par l'absorption/émission de lacunes et d'interstitiels. A l'équilibre thermodynamique, la concentration de ces défauts ponctuels est donnée par :

$$c_0 = \exp(-G_f/kT) \quad (4.1)$$

où G_f est l'énergie de Gibbs de formation du défaut. Pour les défauts ponctuels, on néglige souvent les contributions entropiques de cette énergie de Gibbs et on associe souvent G_f à l'énergie interne E_f . L'énergie de formation des auto-interstitiels est environ deux fois plus grande que celle des lacunes, ce qui conduit à une concentration en auto-interstitiels très faible à l'équilibre thermodynamique. Pour des raisons de simplicité, nous négligerons par la suite le rôle des auto-interstitiels. On peut noter cependant que leur influence devient importante dans certaines situations où le système est loin de l'équilibre thermodynamique tels que les matériaux sous irradiation.

Un calcul élémentaire de la vitesse de montée décrit dans les ouvrages de référence (Friedel 64, Hirth 68) consiste à résoudre l'équation de Fick pour la diffusion moyennant certaines approximations. On considère une dislocation de caractère coin rectiligne et isolée qui joue le rôle d'une source ou d'un puits de lacunes. On suppose la dislocation infinie suivant la direction z , ce qui nous permet de considérer le problème invariant suivant cette direction. Le calcul du flux de lacunes arrivant sur la dislocation permet de déduire la vitesse de montée de celle-ci. La concentration en lacunes obéit à l'équation de diffusion :

$$\dot{c} = \nabla M(c) \nabla \mu \quad (4.2)$$

où μ est le potentiel chimique des lacunes et $M(c)$ leur mobilité. Dans la limite diluée, ce qui est le cas de notre situation, la mobilité est reliée au coefficient de diffusion D_v par $M(c) = \frac{\Omega D_v c}{kT}$ où Ω est le volume atomique. Pour simplifier l'équation 4.2, difficile à résoudre dans le cas général, on considère les hypothèses suivantes :

- Les interactions élastiques entre les lacunes et la dislocation sont négligeables et on peut écrire $\mu(c) = kT \ln(c/c_0)$, où c_0 désigne la concentration d'équilibre.
- On considère que la dislocation se déplace très lentement par rapport à la mise à l'équilibre du champ de lacunes. On néglige donc l'effet du déplacement de la dislocation sur le profil de diffusion des lacunes. On considère alors que le champ de concentration suit une dynamique quasi-statique par rapport au déplacement de la dislocation et on s'intéresse à la vitesse de montée dans le régime stationnaire où $\dot{c} = 0$.

Avec ces hypothèses, l'équation 4.2 se simplifie en une équation de Laplace :

$$\Delta c(r) = 0 \quad (4.3)$$

L'équation en symétrie cylindrique n'admet pas de solution en milieu infini, ce qui oblige à considérer une frontière extérieure située à une distance finie que l'on note R_∞ . On introduit également un rayon interne r_d pour éviter la singularité en $r = 0$ (figure 4.1). On suppose que la concentration en R_∞ est maintenue à une valeur c_∞ . La concentration au niveau de la dislocation notée c_d est fonction de la contrainte agissant sur la dislocation. Dans le cas général, cette dernière est soumise à une contrainte σ de laquelle on déduit la force de Peach et Kohler dans la direction de montée :

$$F_{pk} = ((\sigma b) \wedge l) \cdot n \quad (4.4)$$

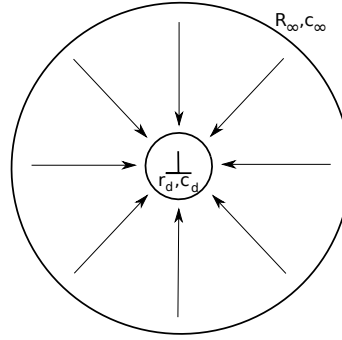


FIGURE 4.1 – Schéma de la montée d'une dislocation coin par la diffusion de lacunes dans un cylindre creux de rayons r_d et R_∞ .

où $\wedge$ indique le produit vectoriel et l et n sont respectivement la direction de la ligne et la direction de montée de la dislocation. La concentration au niveau de la dislocation c_d est obtenue en supposant que la production et la destruction de lacunes sont instantanées tout le long de la dislocation et qu'il y a donc un équilibre local entre la dislocation et la population de lacunes environnantes. Cette supposition mentionnée par la suite comme "hypothèse de l'équilibre local" vient s'ajouter à celles listées plus haut. La concentration au niveau de la dislocation est choisie de telle sorte que le travail issu de la force de Peach et Koehler est égal au changement d'énergie libre associé à la destruction ou la création de lacunes au niveau de la dislocation (Lothe 67, Hirth 68). On en déduit la concentration au niveau de la dislocation :

$$kT \ln(c_d/c_0) = F_{pk}\Omega/b \quad \text{donc} \quad c_d = c_0 \exp\left(\frac{F_{pk}\Omega}{kTb}\right) \quad (4.5)$$

En intégrant l'équation 4.3 avec ces conditions aux limites, on obtient le champ de concentration :

$$c(r) = c_\infty + (c_\infty - c_d) \frac{\ln(r/R_\infty)}{\ln(R_\infty/r_d)} \quad (4.6)$$

La vitesse de montée est obtenue en intégrant le flux de lacunes $j = -M\nabla\mu$ arrivant sur la dislocation en r_d . On obtient finalement :

$$v = \frac{2\pi c_0 D_v}{b \ln(R_\infty/r_d)} \left(\frac{c_\infty}{c_0} - e^{F_{pk}\Omega/kTb} \right) \quad (4.7)$$

Ainsi, on constate que la montée des dislocations est entraînée par deux forces motrices d'origines différentes :

- Une force d'origine chimique traduite par le terme c_∞/c_0 . Si la concentration en lacunes est différente de c_0 (provenant par exemple d'une sous/sursaturation due à un traitement thermique), la dislocation agit comme un puits ou une source de lacunes et absorbe/émet des lacunes afin de rétablir la concentration à l'équilibre.
- Une force d'origine mécanique traduite par le terme $e^{F_{pk}\Omega/kTb}$. Si une contrainte (extérieure ou provenant de la microstructure environnante) est appliquée à la dislocation, le système minimise son énergie par le travail de la force de Peach et Koehler, ce qui conduit à la montée de la dislocation.

Quelle que soit la nature de la force motrice (chimique ou mécanique), le processus limitant est la diffusion vers/depuis le cœur de la dislocation. L'énergie d'activation du processus de montée intégré dans le préfacteur $c_0 D_v$ est l'énergie d'auto-diffusion $E_m + E_f$ (où E_f et E_m désignent respectivement l'énergie de formation et de migration des lacunes)

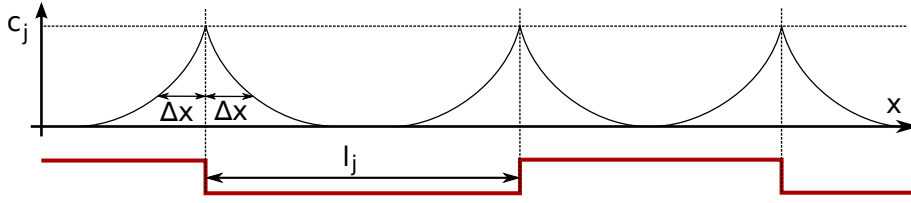


FIGURE 4.2 – Profil de diffusion de lacunes le long du cœur d'une dislocation faiblement crantée.

On peut également noter que les facteurs géométriques r_d et R_∞ apparaissent à l'intérieur d'un logarithme dans l'équation 4.7. Ainsi, à partir du moment où $R_\infty \gg r_d$, le choix spécifique des valeurs de r_d et R_∞ influe peu sur la vitesse de montée.

4.1.2 Calcul de la vitesse de montée dans le cas d'une concentration faible en crans

L'hypothèse de l'équilibre local des lacunes avec la dislocation est souvent remise en question dans la littérature. En effet, les dislocations absorbent/émettent des lacunes au niveau de crans, des marches élémentaires le long de la ligne de la dislocation. Une faible concentration en crans ne permet pas de maintenir la concentration en lacunes à l'équilibre local tout le long de la ligne de dislocation.

Lothe (Lothe 60) propose un critère pour déterminer la validité de l'hypothèse de l'équilibre local. Considérons une dislocation coin qui possède une distance moyenne entre crans notée l_j (figure 4.2). On applique une contrainte σ^a suivant la direction du vecteur de Burgers. En conséquence, la force de Peach et Khoeler ne possède qu'une composante de montée. On suppose que σ^a est suffisamment faible pour considérer la vitesse des crans comme très lente comparée au temps caractéristique de la diffusion des lacunes. On considère également que la population de lacunes autour des crans est à l'équilibre avec celui-ci. Ainsi, l'hypothèse de l'équilibre local est portée au niveau de chaque cran. La création de lacunes dans le cœur de la dislocation est plus facile que dans le matériau massif. On y associe une différence d'énergie de formation $\Delta E_f = E_f - E_f^c$ où E_f et E_f^c sont respectivement l'énergie de formation des lacunes dans le volume et dans le cœur de la dislocation. La concentration au niveau de chaque cran est donc $c_j = c_0 \exp(\Delta E_f + \sigma \Omega / kT)$. La diffusion de lacunes dans le cœur de la dislocation est également plus facile que dans le volume. On y associe une différence d'énergie de migration $\Delta E_m = E_m - E_m^c$.

Le temps de vie moyen d'une lacune dans le cœur de la dislocation est de l'ordre de $\tau = \frac{1}{\nu} \exp((\Delta E_m + \Delta E_f) / kT)$ où ν est une fréquence d'attaque, typiquement de l'ordre de la fréquence de Debye. Pendant ce temps, la lacune effectue une marche aléatoire le long du cœur de la dislocation et s'éloigne du cran d'une distance moyenne

$$\Delta x = \sqrt{a^2 \nu \tau} = a \exp\left(\frac{\Delta E_m + \Delta E_f}{2kT}\right) \quad (4.8)$$

où a désigne une distance de l'ordre de la distance inter-atomique. Δx est également la longueur caractéristique du profil de diffusion des lacunes autour de chaque cran (voir figure 4.2). On suppose alors que l'ensemble de la dislocation est à l'équilibre si $\Delta x > l_j$. Si on considère une ligne de dislocation sur laquelle la population en crans est à l'équilibre thermique, on a $l_j = a \exp(E_j / kT)$ où E_j est l'énergie de création d'un cran. On obtient finalement l'inégalité suivante entre les différentes énergies :

$$\frac{\Delta E_m + \Delta E_f}{2} > E_j \quad (4.9)$$

On peut noter que le cas de la montée par absorption de lacunes ($\sigma < 0$) est symétrique et conduit à la même inégalité. Le tableau 4.1 présente les énergies des crans pour 4 matériaux cubiques faces centrées ainsi qu'une évaluation de $(\Delta E_m + \Delta E_f)/2$ à partir de l'énergie d'auto diffusion (Friedel 64, Hirth 68). On constate que l'inégalité 4.9 n'est jamais vérifiée. On peut également noter que pour les matériaux où les dislocations sont fortement dissociées, l'énergie de création de crans est élevée et on est d'autant plus loin de l'hypothèse de l'équilibre local.

	E_j (eV) (Clouet 13)	$(\Delta E_m + \Delta E_f)/2 \simeq E_{sd}/4$ (Madelung 90)
Cu	2.5	0.5
Ni	2.5	0.73
Au	1.5	0.45
Al	0.7	0.33

TABLE 4.1 – Énergies de formation de crans (Clouet 13) et une évaluation de $(\Delta E_m + \Delta E_f)/2$ par le quart de l'énergie d'auto-diffusion (Madelung 90). On peut en effet considérer que $\Delta E_m \simeq E_m/2$ et $\Delta E_f \simeq E_f/2$ (Friedel 64, Hirth 68).

Des modèles ont été proposés pour évaluer la vitesse de montée dans ces cas en résolvant l'équation de Fick autour de chaque cran (Lothe 60, Balluffi 69, Caillard 03). Dans le cas où les crans sont suffisamment éloignés les uns des autres pour considérer qu'ils n'interagissent pas, la vitesse obtenue prend la forme :

$$v = \frac{4\pi c_0 D_v}{b \ln(\Delta x/b)} \frac{\Delta x}{l_j} \left(\frac{c_\infty}{c_0} - e^{F_{pk}\Omega/kTb} \right) \quad (4.10)$$

L'énergie d'activation associée à cette nouvelle vitesse de montée est $E_m + E_f - (\Delta E_m + \Delta E_f)/2 + E_j$ qui, d'après les valeurs numériques du tableau 4.1, est supérieure à l'énergie d'auto-diffusion, énergie d'activation de la montée si on considère l'hypothèse de l'équilibre local tout le long de la dislocation (équation 4.7).

Toutefois, on peut noter que la population en crans le long d'une dislocation peut s'éloigner de sa concentration à l'équilibre. Lorsque la dislocation présente une courbure dans la direction de montée, les crans sont géométriquement nécessaires (Friedel 64). De plus, le croisement de dislocations coins glissant dans des plans différents conduit à la création d'un cran sur chacune des dislocations. Ainsi dans certaines configurations, la population en crans peut présenter une concentration supérieure à sa concentration d'équilibre.

D'autre part, lorsque la contrainte appliquée devient suffisamment importante, les crans de signes opposés s'annihilent rapidement et la concentration en crans chute en dessous de l'équilibre malgré les deux effets précédemment cités. La nucléation de nouveaux crans est nécessaire pour poursuivre le processus de montée. Dans ce régime, le taux de nucléation de crans le long de la ligne de dislocation pilote la vitesse de montée. Caillard et Martin (Caillard 03) présentent un modèle analytique pour évaluer la vitesse de montée dans ce régime.

4.1.3 Mesures expérimentales de la vitesse de montée

Afin de mieux comprendre les mécanismes de montée d'un point de vue expérimental, des observations ont été réalisées sur divers métaux. Une partie de ces études s'attachent à comparer les mesures expérimentales aux approches analytiques présentées plus haut afin de discuter les hypothèses sur lesquelles ces approches reposent.

Seidman et al. (Seidman 65, Seidman 66b) étudient la montée des dislocations dans l'or dans les cas d'une sursaturation et d'une sous-saturation en lacunes. Les auteurs

s'attachent particulièrement à mesurer l'efficacité des dislocations comme source des lacunes. La variation de la concentration en lacunes reliée à la vitesse de montée des dislocations est obtenue par des mesures de résistivité. Dans le cas des trempes (sur-saturation en lacunes), les mesures expérimentales sont en bon accord avec le modèle analytique obtenu en considérant que les dislocations agissent comme des puits parfaits de lacunes. En revanche, dans le cas d'une chauffe rapide du matériau (sous-saturation en lacunes), la vitesse de montée mesurée est un ordre de grandeur inférieur à celle prédite par l'équation 4.7. Ces mesures semblent indiquer que, dans certaines conditions, les dislocations ne se comportent pas comme des sources parfaites de lacunes.

Une manière simple de mesurer une vitesse de montée est d'observer la cinétique des boucles prismatiques. Sous l'effet de la tension de ligne et d'une éventuelle sursaturation en lacunes, de telles boucles rétrécissent/croissent par émission/absorption de lacunes et leur cinétique est facilement mesurable au microscope électronique à transmission. Silcox et Whelan (Silcox 60) sont les premiers à observer la cinétique de telles boucles dans l'aluminium. Ils montrent que l'énergie d'activation liée à ce processus est très proche de l'énergie d'auto-diffusion. Des études plus fines (Tartour 68, Powell 75) montrent que la cinétique de rétrécissement des boucles est contrôlée par la diffusion et est en bon accord avec les formules théoriques dérivées dans l'hypothèse de l'équilibre local (Seidman 66a, Tartour 68). Les observations en microscopie électronique (Silcox 60, Tartour 68) montrent que la majorité des boucles observées conservent une forme arrondie au cours de leur cinétique. Cette morphologie indique la présence d'une forte concentration en crans au niveau de certaines régions de la boucle (Silcox 60, Caillard 03). Cette forte densité en crans explique le bon accord entre la cinétique mesurée et les expressions analytiques trouvées sous l'hypothèse de l'équilibre local. Il est fait mention (Caillard 03) que les boucles dont la taille augmente au cours du temps présentent souvent des formes anguleuses (hexagones), ce qui laisse supposer que la concentration en crans est faible et que la vitesse de montée peut être limitée par la nucléation de crans. Malheureusement, la cinétique de telles boucles n'est pas étudiée quantitativement.

La plupart des études de fluage des monocristaux ne permettent pas de déduire des éléments quantitatifs sur la vitesse de montée des dislocations. En effet, même si le rôle de la montée est fondamental dans de telles expériences, le glissement des dislocations est à l'origine de la majeure partie de la déformation plastique mesurée. Cependant, les cristaux de structure hexagonale sollicités suivant l'axe c ne se déforment que par la montée de dislocations prismatiques (Edelin 73a). Le Hazif et al. (Le Hazif 68) ont tiré parti de cette situation pour étudier la montée dans le béryllium. L'énergie d'activation du processus est proche de celle de l'auto-diffusion et la loi de fluage est donnée par $\dot{\epsilon} \sim \sigma^{3.5}$. Caillard et Martin (Caillard 03) proposent une interprétation convaincante de cet exposant dans le cadre d'une cinétique de montée limitée par la nucléation de crans. Edelin et Poirier (Edelin 73a, Edelin 73b) présentent des études similaires effectuées sur le magnésium. L'énergie d'activation du processus de montée (1.8 eV) est significativement plus grande que l'énergie d'auto-diffusion (1.43 eV). Les auteurs montrent que les modèles basés sur l'hypothèse de l'équilibre local ou sur une population de crans à l'équilibre ne permettent pas de rendre compte simultanément des valeurs observées de l'énergie d'activation, de l'exposant de la contrainte et de l'ordre de grandeur de la vitesse de montée. Caillard et Martin (Caillard 03) interprètent les résultats d'Edelin et Poirier dans le cadre d'une vitesse de montée limitée par la nucléation des crans. Leur modèle permet de rendre compte de l'énergie d'activation élevée et des ordres de grandeur des vitesses de montée. En revanche, l'exposant de la contrainte est significativement plus faible que celui trouvé expérimentalement.

En résumé, les différentes études expérimentales permettent de conclure que lorsque la densité en crans est élevée le long de la ligne (boucles prismatiques), les vitesses de montée obtenues sont en bon accord avec les modèles basés sur l'hypothèse de l'équilibre local. En revanche, dans certaines situations, les résultats expérimentaux semblent indiquer que la vitesse de montée peut être contrôlée par l'absorption/émission de lacunes le long de la ligne, ce processus étant ralenti par une faible concentration en crans le long de la ligne et par la nucléation de crans.

4.1.4 Les techniques de simulation pour l'étude de la montée

La montée des dislocations est un sujet qui a connu un regain d'intérêt au cours de ces dernières années, les moyens de simulation actuels ouvrant de nouvelles possibilités pour une étude plus précise de ce processus.

Les simulations atomiques apparaissent comme des techniques adaptées à ce type de problèmes car elles reposent sur un minimum d'hypothèses et rendent compte des défauts (dislocations, lacunes, crans) de manière précise. Kabir et al. (Kabir 10) ont étudié la montée d'un dipôle de dislocations dans le fer au moyen de simulations de type Monte-Carlo. Cependant, les tailles de systèmes accessibles restent limitées. De plus, les concentrations en lacunes ainsi que la densité de dislocations sont très importantes dans ces simulations. La comparaison des résultats issus de ces simulations avec l'approche analytique présentée dans le paragraphe 4.1.1 (équation 4.7) montre une bonne correspondance (Clouet 11).

La montée des dislocations a également été abordée au moyen du Champ de Phase Cristallin (PFC¹) (Berry 06). Cette approche repose sur l'évolution d'un champ qui représente la probabilité de présence d'un atome dans l'espace. L'avantage de cette méthode est qu'elle permet d'étudier qualitativement des mécanismes diffusifs à une échelle atomique. Cependant, les équations continues sont intégrées au moyen d'une grille sub-atomique, ce qui limite son application pour des systèmes de taille plus importante. De plus, le nombre réduit de paramètres du modèle ne permet pas de réaliser des études quantitatives sur la vitesse de montée.

La Dynamique des Dislocations (DD) est un outil de choix pour étudier l'évolution des dislocations à des échelles mésoscopiques. Des études utilisant la DD (Bakó 06, Lim 12, Lim 09) ou une technique équivalente de type level-set (Chen 10, Xiang 03, Quek 11) traitent la montée des dislocations comme un phénomène conservatif en introduisant une mobilité de montée, en général du même ordre de grandeur que la mobilité de glissement. En réalité, la montée des dislocations est contrôlée par la diffusion des lacunes et Bakó et al. (Bakó 11) montrent que 10 ordres de grandeur séparent les vitesses de montée et de glissement à une température $T_f/3$. Afin d'étudier l'influence de la montée sur le comportement plastique de couches minces, Ayas et al. (Ayas 12) proposent un modèle de DD 2D dans lequel les mobilités de montée et de glissement sont séparées de 4 ordres de grandeur, ce qu'ils jugent suffisant pour assurer la séparation des échelles de temps entre les deux mécanismes. Cependant, dans cette étude, la montée des dislocations est toujours considérée comme un processus conservatif.

Raabe (Raabe 98) suggère d'utiliser la formule 4.7 dans la dynamique des dislocations afin de rendre compte de la diffusion des lacunes. Mordehai et al. (Mordehai 08) utilisent cette technique pour étudier le mûrissement d'une population de boucles prismatiques. Afin de prendre en compte la cinétique de montée dans le cas d'une faible concentration en crans, les auteurs suggèrent d'utiliser la vitesse de montée de l'équa-

1. Phase-Field Crystal

tion 4.10 dans leur approche. Le couplage avec le glissement des dislocations (Bakó 11) a permis d'étudier les mécanismes d'interaction entre boucles prismatiques. Gao et al. (Gao 11) proposent une approche différente en couplant la DD avec un modèle de diffusion de cœur. Dans ce modèle, la diffusion des lacunes dans le volume est supposée instantanée bien qu'elle soit le processus limitant dans de nombreux cas.

Dans (Keralavarma 12), les auteurs proposent un modèle de DD 2D afin d'étudier le comportement de l'aluminium en fluage. Dans ces simulations, la vitesse de montée est obtenue via l'équation 4.7 en prenant comme paramètre c_∞ la concentration locale en lacunes qui est obtenue en résolvant l'équation de Fick. La résolution de l'équation de Fick est effectuée à une échelle macroscopique (supérieure à la distance moyenne entre dislocations) ce qui permet de rendre compte des hétérogénéités de concentration en lacunes dans l'ensemble du matériau. Ces simulations 2D permettent d'étudier le comportement en fluage de l'aluminium et de retrouver un exposant de contrainte proche de celui déterminé expérimentalement.

On peut également mentionner les travaux et Geers et al. (Geers 13) qui reposent sur des équations continues régissant des champs de densité de dislocation. Ces équations sont inspirées de celles que l'on obtiendrait par un changement d'échelle à partir des interactions entre dislocations individuelles (Groma 97).

La dynamique des dislocations est une technique puissante pour étudier la montée des dislocations à une échelle pertinente. Pourtant les modèles proposés jusqu'à présent ne prennent pas en compte les inhomogénéités de concentration en lacunes entre les dislocations. En toute rigueur, cette technique n'est valable que lorsque les dislocations sont suffisamment éloignées les unes des autres pour considérer que les champs de diffusion sont indépendants. Néanmoins, au cours de la déformation plastique, les dislocations ont tendance à se rapprocher les unes des autres et à former des murs, jonctions et empilements, configurations pour lesquelles l'utilisation de l'équation 4.7 constitue une lourde approximation. De plus, les interactions élastiques entre lacunes et dislocations sont négligées alors qu'elles peuvent avoir une influence significative dans certains cas.

4.2 Modèle champ de phase pour la montée des dislocations

Les méthodes champ de phase apparaissent particulièrement adaptées à l'étude de la montée des dislocations car elles prennent en compte les phénomènes diffusifs, la dynamique hors-équilibre et les interactions élastiques. Li et al. (Li 12) proposent un modèle champ de phase pour étudier la cinétique de croissance de boucles d'interstitiels dans le fer sous irradiation, ce qui peut s'apparenter à la montée des dislocations. Cependant, leur formulation ne respecte pas le caractère conservatif des interstitiels à l'origine de la montée. En effet, l'observation attentive des équations du modèle met en évidence que la boucle de dislocation peut évoluer sans absorption ou émission de défauts ponctuels. De plus, la définition de l'énergie libre des défauts ponctuels à l'intérieur de la boucle est différente de celle du reste du matériau massif, ce qui est erroné étant donné la nature identique de ces deux milieux.

Dans cette partie, nous présentons un modèle de champ de phase pour la montée des dislocations. Outre le fait qu'il respecte le caractère conservatif des défauts et reproduit correctement leur thermodynamique, un des avantages de cette formulation réside dans l'introduction d'un paramètre dynamique noté L qui contrôle la cinétique d'absorption et d'émission des lacunes au niveau des dislocations, ce qui permet d'étudier les mécanismes de montée limités par l'absorption/émission de lacunes.

4.2.1 Présentation du modèle

Nous proposons un modèle de montée des dislocations en champ de phase basé sur une distinction entre les lacunes contenues dans les boucles de dislocations et celles en solution dans le matériau massif. Les équations sont écrites de telle sorte que le nombre total de lacunes est conservé. On se restreint au cas des matériaux non irradiés où le rôle des auto-interstitiels est négligeable. Une formulation du modèle avec des interstitiels est toutefois évidente, puisque basée sur les mêmes principes. Avant de présenter l'énergie libre et les équations dynamiques du modèle, on définit les champs suivants qui décrivent l'état du système :

- La concentration atomique en lacunes notée $c(r)$.
- Un ensemble de champs de phase $\phi_i(r)$ représentant les boucles de dislocations présentes dans différents plans cristallographiques : $\phi_i(r) = 1$ si r est à l'intérieur de la boucle d'indice i et 0 en dehors. Pour des raisons de simplicité, on présentera le modèle pour le cas d'une seule boucle prismatique de caractère coin de normale n et de vecteur de Burgers b ($b \wedge n = 0$).
- Un champ noté $\psi(r) = c(r) + \sum_i \phi_i(r)$ qui représente la population totale de lacunes dans le système et qui est conservé au cours du temps.

L'énergie du système

La densité d'énergie libre du système peut se décomposer en trois termes, l'énergie chimique des lacunes $f_{ch}(c)$, l'énergie de cœur de la dislocation $f_{core}(\phi)$ et l'énergie élastique $f_{el}(\epsilon, \phi, c)$.

Dans la limite des systèmes dilués, la densité d'énergie libre chimique d'une population de lacunes s'écrit :

$$f_{ch}(c) = \frac{E_f}{\Omega} c + \frac{kT}{\Omega} [c \ln(c) + (1 - c) \ln(1 - c)] \quad (4.11)$$

où E_f désigne l'énergie de formation des lacunes et Ω le volume atomique. Lorsque $c \ll 1$ (ce qui est le cas lorsqu'on est proche de l'équilibre), le terme $(1 - c) \ln(1 - c)$ devient négligeable et le potentiel chimique $\mu = \frac{\partial f_{el}}{\partial c}$ prend la forme usuelle $\mu = \frac{kT}{\Omega} \ln(c/c_0)$ où $c_0 = \exp(-E_f/kT)$ est la concentration à l'équilibre.

L'énergie de cœur de la dislocation dépend uniquement du champ de phase ϕ et s'exprime comme la somme d'un potentiel double-puits symétrique et d'une énergie de gradient qui pénalise les variations spatiales de ϕ :

$$f_{core}(\phi) = A\phi^2(1 - \phi)^2 + \frac{B}{2}|n \wedge \nabla \phi|^2 \quad (4.12)$$

Les paramètres A et B permettent de contrôler l'épaisseur du cœur w ainsi que son énergie. Le gradient de ϕ est projeté dans le plan de la boucle afin de faire apparaître une contribution d'énergie de cœur uniquement dans le plan de la boucle. Dans certains cas, la boucle de lacunes est associée à une faute d'empilement. On peut ajouter un terme $\frac{C}{2}|n \cdot \nabla \phi|^2$ afin de tenir compte de cette contribution énergétique supplémentaire. Pour des raisons de simplicité, cette contribution n'est pas considérée par la suite. On peut remarquer que le potentiel double-puits ne permet pas de simuler des configurations où plusieurs boucles sont imbriquées les unes dans les autres (par exemple des boucles circulaires concentriques). Pour ce faire, on peut remplacer le terme de double-puits par un terme périodique en ϕ pour lequel on retrouve un minimum d'énergie libre pour les valeurs entières de ϕ . Pour des raisons de simplicité, on conservera le potentiel double-puits pour lequel l'approche analytique est simple (voir paragraphe 3.3.2).

Enfin, l'énergie élastique est considérée dans le cadre de l'élasticité linéaire en petites déformations :

$$f_{el}(\boldsymbol{\varepsilon}, c, \phi) = \frac{1}{2} C_{ijkl} [\varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^0(c, \phi)] [\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^0(c, \phi)] - \sigma_{ij}^a \varepsilon_{ij} \quad (4.13)$$

où σ_{ij}^a désigne les composantes de la contrainte extérieure appliquée au système. Les constantes élastiques C_{ijkl} sont supposées indépendantes de l'espace (élasticité homogène), ce qui revient à négliger l'influence de la concentration en lacunes sur les constantes élastiques. Des calculs atomiques (Clouet 06) montrent que cette contribution peut être négligée lorsque l'on s'éloigne du cœur de la dislocation. Toutefois, on peut noter que la prise en compte de l'inhomogénéité des constantes élastiques ne constitue pas un obstacle majeur. Seule la résolution de l'équilibre élastique nécessite des méthodes numériques un peu plus sophistiquées (Moulinec 98, Boussinot 07). Pour des raisons de simplicité, on restera dans le cadre de l'élasticité homogène. La déformation libre notée $\varepsilon^0(c, \phi)$ peut être décomposée en deux contributions provenant des lacunes et des boucles de dislocation. On suppose que la déformation libre associée à une population de lacunes est isotrope, purement volumique et qu'elle varie linéairement avec la concentration :

$$\varepsilon_{ij}^{0,v}(c) = \frac{V^* c}{3\Omega} \delta_{ij} \quad (4.14)$$

où V^* désigne le volume de relaxation d'une lacune isolée. On peut noter que la généralisation à des déformations libres plus complexes faisant par exemple intervenir des composantes de cisaillement est évidente. La déformation libre associée à une boucle de dislocation de vecteur de Burgers b et de normale n s'écrit :

$$\varepsilon_{ij}^{0,d}(\phi) = \frac{1}{2} (b_i n_j + b_j n_i) h(\phi) \delta(\xi) \quad (4.15)$$

où $\delta(\xi)$ désigne la fonction de Dirac et ξ la distance au plan de la boucle de dislocation. La fonction $h(\phi)$ est une fonction d'interpolation telle que $h(0) = 0$, $h(1) = 1$ et $h'(0) = h'(1) = 0$. Les dérivées nulles en 0 et en 1 permettent d'assurer que la contribution élastique ne modifie pas les minima d'énergie en $\phi = 0$ et $\phi = 1$ (Appolaire 13).

Finalement, l'énergie libre totale du système s'écrit simplement comme l'intégrale suivante :

$$\mathcal{F}(\{c\}, \{\phi\}, \{\varepsilon\}) = \int_V \{f_{ch}(c) + f_{core}(\phi) + f_{el}(\boldsymbol{\varepsilon}, c, \phi)\} dV \quad (4.16)$$

Les équations dynamiques

Les champs $\{\phi\}$ et $\{c\}$ ne sont pas conservés. Cependant, la boucle de dislocation croît/rétrécit en absorbant/émettant des lacunes de telle sorte que la somme $\psi = c + \phi$ est conservée. Pour assurer cette conservation, on suppose que le champ $\{\psi\}$ suit une dynamique conservée de type Cahn-Hilliard :

$$\dot{\psi} = \nabla \cdot M \nabla \frac{\delta \mathcal{F}^*}{\delta \psi} \quad (4.17)$$

où la force motrice dépend de l'énergie libre $\mathcal{F}^*(\{\psi\}, \{\phi\})$, fonctionnelle des champs $\{\psi\}$ et $\{\phi\}$. La signification de la mobilité M sera discutée plus bas. Pour compléter les équations dynamiques, on écrit une dynamique non-conservée de type Allen-Cahn sur le champ $\{\phi\}$:

$$\dot{\phi} = -L \frac{\delta \mathcal{F}^*}{\delta \phi} \quad (4.18)$$

où L est un paramètre dynamique qui contrôle la cinétique du champ de phase $\{\phi\}$. Afin d'exprimer la dynamique en fonction des grandeurs plus naturelles que sont les champs $\{c\}$ et $\{\phi\}$, on effectue le changement de variable $c = \psi - \phi$. Par substitution, on obtient les équations dynamiques suivantes :

$$\dot{c} = \nabla \cdot M \nabla \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta c} + L \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi} - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta c} \right) \quad (4.19)$$

$$\dot{\phi} = -L \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi} - \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta c} \right) \quad (4.20)$$

où la fonctionnelle $\mathcal{F}(\{c\}, \{\phi\})$ est celle écrite plus haut, exprimée en fonction des champs $\{c\}$ et $\{\phi\}$. L'écriture de l'équation 4.19 indique que la mobilité M désigne bien la mobilité des lacunes. Afin de compenser les divergences logarithmiques et de retrouver l'équation de Fick pour $c \rightarrow 0$, la mobilité est exprimée comme :

$$M(c) = \frac{\Omega D_v c (1 - c)}{kT} \quad (4.21)$$

où $D_v = D_0 \exp(-E_m/kT)$ désigne le coefficient de diffusion des lacunes (E_m est l'énergie de migration des lacunes).

Le coefficient cinétique L est quant à lui plus délicat à déterminer. Il doit en effet rendre compte de la cinétique d'absorption/émission, qui fait intervenir de manière complexe la densité de crans le long de la dislocation, leur nucléation et le processus élémentaire d'attachement/détachement d'une lacune au niveau d'un cran. On peut néanmoins estimer ce coefficient au moyen d'un raisonnement sur une population de crans équidistants. Une autre technique plus coûteuse mais plus précise consiste à réaliser un grand nombre simulations à l'échelle atomique et d'en déduire un coefficient L . Dans notre cas, on considérera que L est un paramètre variable et on étudiera son influence sur la cinétique de montée.

On peut distinguer deux temps caractéristiques associés respectivement à la diffusion des lacunes (t_d) et à la cinétique d'absorption/émission au cœur de la dislocation (t_a). Le choix de L et donc du rapport entre ces temps caractéristiques permet de rendre compte des deux régimes de montée discutés dans la littérature :

- Si $L \rightarrow +\infty$ et $t_d \gg t_a$, les échanges entre les lacunes contenues dans la boucle et celles en solution sont instantanés comparés au temps de diffusion des lacunes vers le cœur. Ceci correspond à la situation où la population de crans le long de la ligne est suffisamment élevée pour maintenir l'équilibre local des lacunes autour de la dislocation. Le processus de montée est alors limité par la diffusion des lacunes vers la dislocation.
- Si $L \rightarrow 0$ et $t_d \ll t_a$, les mécanismes d'attachement/détachement au niveau de la ligne de dislocation sont lents comparés à la diffusion des lacunes et la montée est limitée par les processus d'absorption/émission. Ceci correspond au cas où la population en crans le long de la ligne est faible.

Comme dans l'approche proposée dans le chapitre 3, on suppose que les temps caractéristiques des processus diffusifs t_a et t_d sont beaucoup plus grands que le temps caractéristique de mise à l'équilibre mécanique. Ainsi, à l'échelle des processus diffusifs qui nous intéresse, les degrés de liberté mécaniques satisfont toujours l'équilibre mécanique qui s'écrit en fonction des contraintes :

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad \text{avec} \quad \sigma_{ij}(r) = C_{ijkl}(\varepsilon_{kl}(r) - \varepsilon_{kl}^0(r)) \quad (4.22)$$

La résolution de cet équilibre élastique est effectuée avant chaque pas d'intégration des équations de diffusion. On utilise pour cela le formalisme des fonctions de Green de l'élasticité (Khachaturyan 83, Mura 87) (voir annexe A.4). Etant donné que les degrés de liberté mécaniques que sont les déplacements u_i sont instantanément relaxés, ces champs deviennent des fonctionnelles des champs de phase $\{\phi\}$ et de concentration $\{c\}$ et l'énergie libre devient une fonctionnelle de ces seuls champs notée $\mathcal{F}^{eq}(\{c\}, \{\phi\})$. Ainsi, le potentiel chimique du champ de concentration s'écrit :

$$\mu(\{c\}) = \frac{\delta \mathcal{F}^{eq}(\{c\}, \{\phi\})}{\delta c} = \frac{\delta \mathcal{F}(\{c\}, \{\phi\}, \{u_i^{eq}\})}{\delta c} + \int dr' \left. \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta u_i(r')} \right|_{u_i=u_i^{eq}} \frac{\delta u_i^{eq}(r')}{\delta c(r)} \quad (4.23)$$

Etant donné que les champs de déplacement u_i satisfont l'équilibre mécanique, la première dérivée fonctionnelle de l'intégrande est nulle et le potentiel chimique se calcule simplement. Le même raisonnement est valable pour la force motrice agissant sur le champ ϕ .

Adimensionnement des équations

Les équations 4.19 et 4.20 sont normalisées par les grandeurs suivantes :

- la longueur caractéristique est prise égale à la norme du vecteur de Burgers $l_c = b$
- le temps caractéristique est celui de la diffusion sur cette distance $t_c = b^2/D_v$
- l'énergie caractéristique est $E_c = kT b^3/\Omega c_0(1 - c_0)$.

Afin d'intégrer les équations 4.19 et 4.20 numériquement, on discrétise les champs sur une grille de différences finies décalée. Pour faciliter la résolution de l'équilibre mécanique, les différents champs sont transposés dans l'espace de Fourier. L'annexe A.4 présente les méthodes employées pour l'intégration de 4.19 et 4.20 et pour la résolution de l'équilibre élastique.

4.2.2 Analyse du modèle

Afin de mieux comprendre le comportement du modèle, on propose dans ce paragraphe un traitement analytique permettant d'obtenir la vitesse de montée quel que soit la valeur de L . On néglige les interactions élastiques entre la dislocation et les lacunes ($V^* = 0$) et on considère une dislocation coin rectiligne infinie. Le problème est donc bi-dimensionnel.

On considère une dislocation créée à partir d'une plaquette d'épaisseur b (figure 4.3.a) suffisamment longue pour considérer que la dislocation est isolée. Les champs $\{\phi\}$ et $\{c\}$ ont des longueurs caractéristiques très différentes : d'une part, on considère que les paramètres du potentiel double-puits et du terme de gradient (équation 4.12) sont choisis de telle sorte que le modèle génère un cœur de dislocation localisé avec une largeur finie w de l'ordre de quelques b le long de x . D'autre part, au voisinage de la dislocation, le champ de concentration varie sur une distance imposée par la condition aux limites loin de la dislocation. Celle-ci est évidemment toujours beaucoup plus grande que la taille du cœur (elle peut typiquement correspondre à la distance moyenne entre dislocations). On peut donc supposer que la concentration est constante $c = c_d$ sur un intervalle $\mathcal{D}$ qui contient le cœur de la dislocation (figure 4.3.b) et dont les dimensions le long de x et y sont respectivement de l'ordre de b et w .

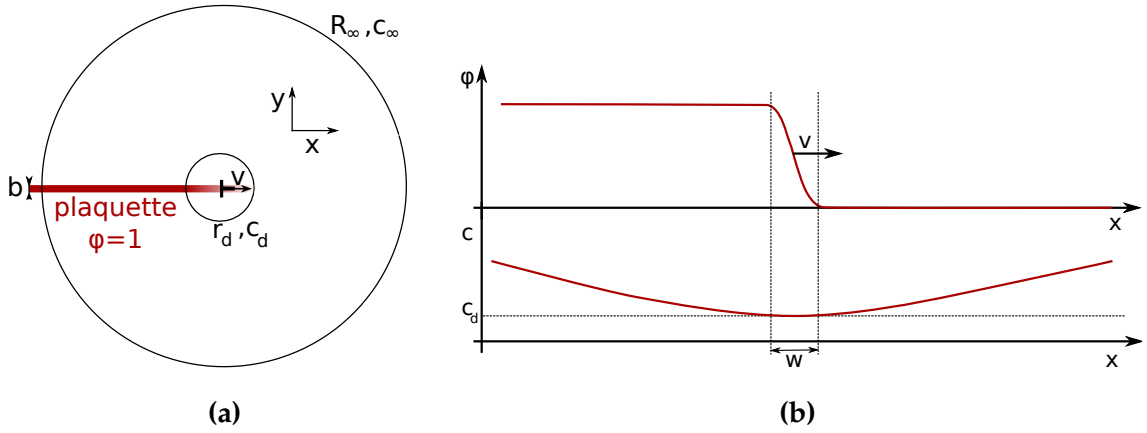


FIGURE 4.3 – (a) Configuration considérée présentant une dislocation isolée. Une plaquette d'épaisseur b où $\phi = 1$ est introduite le long de l'axe x . On considère que la diffusion des lacunes a lieu dans un cylindre creux de rayons r_d et R_∞ où les conditions aux limites sont données par c_d et c_∞ . (b) Profil du champ de phase $\phi(x)$ et de concentrations en lacunes $c(x)$ le long de l'axe de la plaquette.

On considère tout d'abord qu'il n'y a pas de force motrice conduisant à la montée de la dislocation : la contrainte appliquée est nulle et il n'y a pas de sursaturation. On cherche la solution du champ $\phi(x)$ à l'équilibre, c'est-à-dire $\dot{\phi} = 0$ dans l'équation 4.20. Le calcul des différents termes conduit à l'équation suivante :

$$2A\phi(1-\phi)(1-2\phi) - B\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + b\sigma_{22}(x, \{\phi\})h'(\phi) = 0 \quad (4.24)$$

Cette équation est complexe à résoudre analytiquement car σ_{22} dépend de la distribution du champ ϕ . On note ϕ_0 la solution de cette équation.

On considère maintenant que la dislocation se déplace sous l'action d'une force motrice. On se place dans le cas général d'une sur/sous-saturation $c_\infty \neq c_0$ et d'une contrainte appliquée dont on suppose que seule la composante σ_{22}^a est non nulle et sera notée σ^a par la suite. On suppose par ailleurs que le champ ϕ conserve sa forme stationnaire ϕ_0 , quel que soit la vitesse de la dislocation, en se translatant le long de l'axe x . Ainsi, on peut se placer dans le repère mobile lié à l'interface où $\phi(x, t) = \phi_0(x - x_0(t))$, $x_0(t)$ désignant la position de la dislocation au cours du temps. La grandeur $v_1 = \dot{x}_0$ désigne la vitesse de la dislocation. Dans le domaine $\mathcal{D} = w \times b$ où la concentration est constante, l'équation 4.20 devient :

$$-v_1 \frac{\partial \phi_0}{\partial x} = -L \left[2A\phi_0(1-\phi_0)(1-2\phi_0) - B\frac{\partial^2 \phi_0}{\partial x^2} + b\sigma_{22}(x, \{\phi_0\})h'(\phi_0) - \mu(c_d) \right] \quad (4.25)$$

La contrainte σ_{22} peut se décomposer en deux contributions : la contrainte générée par la dislocation elle-même et la contrainte appliquée : $\sigma_{22}(x) = \sigma_{22}^d(x|\{\phi_0\}) + \sigma^a$. Étant donné que ϕ_0 est solution de l'équation 4.24, les deux premiers termes de droite se simplifient avec $b\sigma_{22}^d(x|\{\phi_0\})h'(\phi_0)$. Nous allons maintenant à nouveau tirer profit de la séparation des échelles de longueur évoquée plus haut. Les variations du profil du champ $\phi_0(x)$ sont localisées sur les distances w (le long de x) et b (le long de y) beaucoup plus petites que la distance caractéristique du profil de concentration $c(x)$. On multiplie donc l'équation 4.25 par $\frac{\partial \phi_0}{\partial x}$ et on intègre sur le domaine $\mathcal{D}$ introduit plus haut.

$$-v \int_{\mathcal{D}} \left(\frac{\partial \phi_0}{\partial x} \right)^2 dx dy = -L\sigma^a b \int_{\mathcal{D}} h'(\phi_0) \frac{\partial \phi_0}{\partial x} dx dy + L \int_{\mathcal{D}} \mu(c_d) \frac{\partial \phi_0}{\partial x} dx dy \quad (4.26)$$

En notant $k = \int_{\mathcal{D}} (\partial\phi_0/\partial x)^2$ et en calculant les autres intégrales², on obtient :

$$v_1 = \frac{L}{k} (\mu(c_d) - \sigma^a) \quad (4.27)$$

On peut considérer que l'influence de l'élasticité sur la structure de l'interface est faible (ce qui est le cas pour le choix des paramètres considérés plus tard). Dans ces conditions, le terme $b\sigma_{22}^d(x|\{\phi_0\})h'(\phi_0)$ de l'équation 4.24 peut être négligé et le champ ϕ en régime stationnaire adopte la solution bien connue de la forme :

$$\phi_0(x) = \frac{1}{2} \left(1 - \tanh \left(\frac{2x}{w} \right) \right) \quad (4.28)$$

avec $w = 2\sqrt{2B/A}$. Le terme k peut être calculé en fonction de l'épaisseur de l'interface $k = 2/3w$.

Pour déterminer la concentration c_d qui dépend du profil de diffusion des lacunes, on considère que l'échelle de temps liée à la vitesse de la dislocation est très grande comparée à l'échelle de temps de la diffusion des lacunes. En d'autres termes, le mouvement de la dislocation n'a pas d'impact sur le profil de concentration en lacunes. En dehors du domaine $\mathcal{D}$, il n'y a ni puits ni source de lacunes. En approximant le potentiel chimique des lacunes par son expression usuelle en concentration diluée $\mu(c) = \frac{kT}{\Omega} \ln \left(\frac{c}{c_0} \right)$, l'équation stationnaire pour la concentration 4.19 se réduit à :

$$\Delta c = 0 \quad (4.29)$$

De manière identique à celle présentée dans le paragraphe 4.1, on résout cette équation dans un cylindre creux de rayon intérieur r_d et de rayon extérieur R_∞ (figure 4.3.a). On détermine le champ de concentration $c(r)$ et on en déduit la vitesse de montée :

$$v_2 = \frac{2\pi D_v c_0}{b \ln(R_\infty/r_d)} \left(\frac{c_\infty}{c_0} - \frac{c_d}{c_0} \right) \quad (4.30)$$

qui dépend également de c_d .

Les deux expressions 4.27 et 4.30 de la vitesse de montée doivent être égales et permettent de fixer c_d . La solution complète pour c_d en fonction des autres grandeurs fait intervenir la fonction W de Lambert³ et s'écrit :

$$\frac{c_d}{c_0} = \frac{\bar{L}}{\Gamma} W \left(\frac{\Gamma}{\bar{L}} \exp \left(\frac{\Gamma}{\bar{L}} \frac{c_\infty}{c_0} + \frac{\sigma^a \Omega}{kT} \right) \right) \quad (4.31)$$

où Γ est un paramètre sans dimension fonction des facteurs géométriques du problème $\Gamma = 4\pi b/3w \ln(R_\infty/r_d)$ et $\bar{L} = Lb^2kT/\Omega D_v c_0$ est un adimensionnement du paramètre L . Une fois cette concentration injectée dans la solution de l'équation 4.30, on obtient la vitesse de montée :

$$v = \frac{2\pi D_v c_0}{b \ln(R_\infty/r_d)} \left[\frac{c_\infty}{c_0} - \frac{\bar{L}}{\Gamma} W \left(\frac{\Gamma}{\bar{L}} \exp \left(\frac{\Gamma}{\bar{L}} \frac{c_\infty}{c_0} + \frac{\sigma^a \Omega}{kT} \right) \right) \right] \quad (4.32)$$

On peut remarquer que cette expression fait intervenir un rapport entre le coefficient cinétique adimensionné $\bar{L}$ et le paramètre géométrique Γ . En toute rigueur, le régime de

2. On considère que les bornes d'intégration suivant la coordonnée x peuvent être portées à $\pm\infty$ afin de simplifier le calcul des intégrales. Par exemple $\int_w \frac{\partial\phi}{\partial x} dx \simeq \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial\phi}{\partial x} dx = -1$

3. définie comme la fonction réciproque de $f(x) = xe^x$, c'est-à-dire $W(xe^x) = x$

montée (limité par la diffusion ou l'absorption de lacunes) ne dépend pas seulement de la valeur absolue du paramètre L mais également des données géométriques du problème. Toutefois, pour les paramètres considérés dans la suite, le paramètre Γ est de l'ordre de grandeur de l'unité. L'expression 4.32, difficile à appréhender dans le cas général, peut être simplifiée pour certaines valeurs limites de $\bar{L}$.

Cas limite $L \gg \Gamma$

Le développement limité de la fonction de Lambert autour de zero⁴ donne

$$v_{L \gg \Gamma} = \frac{2\pi D_v c_0}{b \ln(R_\infty/r_d)} \left[\frac{c_\infty}{c_0} - e^{\frac{\sigma^a \Omega}{kT} + \frac{\Gamma}{L} \frac{c_\infty}{c_0}} \left(1 + \frac{\Gamma}{L} \left(\frac{c_\infty}{c_0} - e^{\frac{\sigma^a \Omega}{kT} + \frac{\Gamma}{L} \frac{c_\infty}{c_0}} \right) \right) \right] \quad (4.33)$$

Pour $\bar{L} \rightarrow +\infty$, on retrouve la vitesse de montée dérivée sous l'hypothèse de l'équilibre local (équation 4.7), ce qui est bien cohérent.

Cas limite $L \ll \Gamma$

En utilisant le développement limité de la fonction de Lambert en l'infini⁵ et en négligeant les termes de second ordre, on obtient :

$$v_{L \ll \Gamma} = \frac{3w}{2} L \left(\frac{kT}{\Omega} \ln \frac{c_\infty}{c_0} - \sigma^a \right) \quad (4.34)$$

où les expressions de Γ et de $\bar{L}$ ont été utilisées pour simplifier l'expression. Dans cette limite, la diffusion des lacunes dans le domaine est très rapide comparée au mécanisme d'absorption/émission. Ainsi, le profil de concentration autour de la dislocation est constant, égal à c_∞ et on retrouve l'expression 4.27 avec $c_d = c_\infty$. Dans ce régime, la vitesse de montée ne dépend plus des dimensions géométriques r_d et R_∞ ni du coefficient de diffusion des lacunes.

4.3 Montée de dislocations isolées et influence du paramètre L

On fait le choix de prendre les paramètres de l'aluminium étant donné le nombre d'études théoriques et expérimentales de la montée qui portent sur ce métal. De plus, la plupart des paramètres utilisés dans ce modèle sont bien connus et peuvent être aisément trouvés dans la littérature.

Les paramètres utilisés dans les simulations présentées dans ce chapitre sont tirés de (Ashcroft 76, Madelung 90) et sont résumés dans le tableau 4.2. En considérant que l'anisotropie des constantes élastiques de l'aluminium est faible, on considère l'approximation isotrope. Les coefficients de Lamé sont calculés à partir de la moyenne de Voigt (Hirth 68). Pour des raisons numériques, la largeur du cœur de la dislocation est surestimée par rapport à une valeur réaliste (de l'ordre de b). En effet, si l'épaisseur de l'interface est trop étroite comparée au pas de grille employé, la dislocation subit une friction de réseau, ce qui altère les résultats. On notera que cette surestimation n'a pas d'effet pourvu que cette longueur reste faible par rapport aux longueurs caractéristiques du champ de diffusion et que le rayon de courbure le long de la dislocation soit beaucoup plus grand que la largeur de l'interface. C'est évidemment le cas pour les configurations 2D abordées dans ce chapitre.

4. développement limité en 0 : $W(x) = x - x^2 + O(x^3)$

5. développement limité en $+\infty$: $W(x) = \ln x - \ln(\ln x) + O(\ln(\ln x))$

vecteur de Burgers b	2.85 Å
pas de grille d	2.85 Å
coefficient de Lamé λ	59 GPa
coefficient de Lamé μ	26 GPa
énergie de formation d'une lacune E_f	0.67 eV
énergie de migration des lacunes E_m	0.61 eV
facteur pré-exponentiel D_0	$1.51 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
volume atomique Ω	16.4 Å^3
énergie de cœur de la dislocation E_{core}	1.0 eV Å^{-1}
largeur du cœur de la dislocation w	17.1 Å

TABLE 4.2 – Paramètres utilisés dans les simulations (Hirth 68, Madelung 90).

Dans cette section, on se concentre sur la montée de dislocations isolées afin de tester l'influence du paramètre $\bar{L}$ sur le processus de montée et comparer les résultats numériques au traitement analytique du paragraphe 4.2.2. Pour le moment, on ne prend pas en compte les interactions élastiques entre la dislocation et les lacunes en imposant le volume de relaxation $V^* = 0$. Nous nous intéresserons tout d'abord au cas d'une force motrice d'origine mécanique (contrainte appliquée) puis nous verrons le cas d'une force motrice d'origine chimique (sur/sous-saturation).

4.3.1 Montée sous l'effet d'une contrainte appliquée

On introduit une plaquette $\phi = 1$ au centre de la simulation afin d'obtenir un dipole de dislocations coins (voir figure 4.4.a). Une contrainte de cisaillement σ_a est appliquée au système. Afin de se rapprocher de la situation considérée dans l'approche analytique, la concentration est maintenue à l'équilibre aux frontières de la simulation ainsi que sur une ligne horizontale au centre de la boîte. On utilise des conditions aux limites périodiques pour la résolution de l'équilibre élastique. Comme condition initiale, on impose la concentration d'équilibre dans l'ensemble du système.

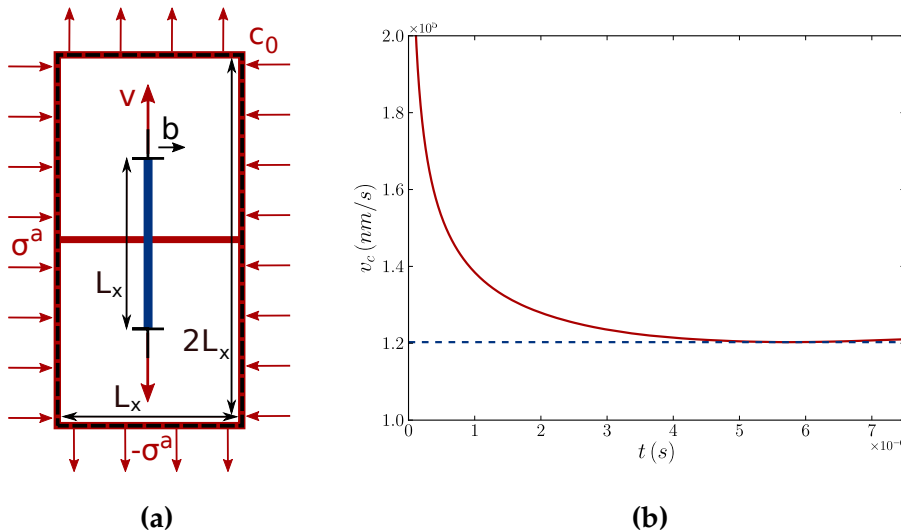


FIGURE 4.4 – (a) Schéma de la configuration étudiée sous contrainte. (b) Détermination de la vitesse stationnaire.

Notre technique de simulation permet d'obtenir l'ensemble de la dynamique du système, y compris le régime transitoire durant lequel le champ de lacunes atteint pro-

gressivement un état stationnaire. La figure 4.4.b montre que la vitesse de la dislocation décroît au cours d'un régime transitoire avant d'atteindre un régime stationnaire. Ce régime stationnaire ne peut cependant se maintenir du fait des interactions élastiques entre les images périodiques des dislocations et la vitesse augmente par la suite légèrement au cours du temps. Une estimation de la vitesse stationnaire est obtenue comme le minimum de la courbe de vitesse (indiqué en pointillés sur la figure 4.4.b).

De la même manière, on calcule les vitesses stationnaires pour différentes contraintes appliquées et pour différentes valeurs du paramètre L . Les résultats obtenus numériquement sont représentés sur la figure 4.5 (points). On remarque tout d'abord que l'on retrouve les bons comportements limites.

- Pour $\bar{L} \gg 1$, on retrouve une forme exponentielle très proche de la solution de l'équilibre local (représentée en pointillés sur la figure 4.5).
- Pour $\bar{L} \ll 1$, on retrouve un comportement linéaire qui est bien cohérent avec le développement limité de la solution analytique 4.34.

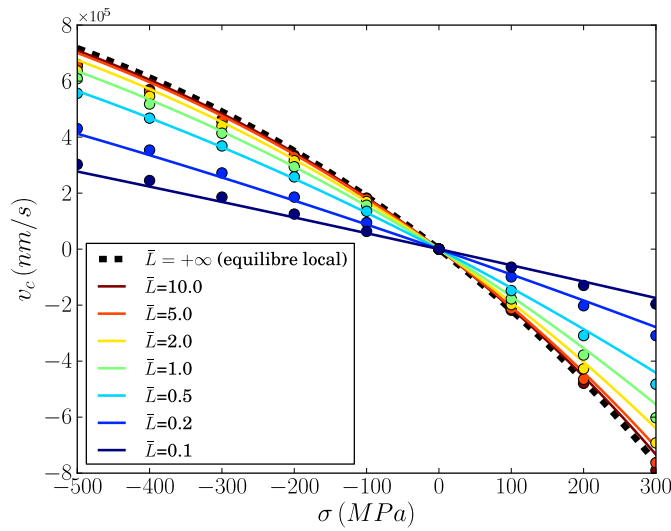


FIGURE 4.5 – Vitesse de montée à $T = 812$ K en fonction de la contrainte appliquée pour différentes valeurs du paramètre $\bar{L}$. Résultats issus des simulation (points) et de la solution analytique de l'équation 4.32 (lignes continues). La solution obtenue avec l'hypothèse de l'équilibre local (équation 4.7) est représentée en pointillés noirs.

	$T = 696$ K	$T = 812$ K	$T = 928$ K
η	2.35	2.28	2.30
R^2	0.996	0.996	0.997

TABLE 4.3 – Résultats des régressions effectuées à différentes températures : le paramètre η et le coefficient de détermination R^2

Pour effectuer une comparaison plus quantitative entre les résultats issus de nos simulations et le traitement analytique du paragraphe 4.2.2, on effectue une régression non linéaire de nos résultats avec la solution de l'équation 4.32. Le seul paramètre de la régression est le facteur géométrique $\eta = 2\pi \ln(R_\infty/r_d)$. En effet, ce paramètre est censé être différent entre les approches analytique et numérique étant données les géométries différentes des conditions aux limites. On effectue cette régression sur 3 jeux de données obtenus à des températures différentes. Les résultats résumés dans le tableau 4.3 montrent que la régression est robuste vis-à-vis de la température et que le coefficient η ne varie pas significativement avec la température, ce qui est bien cohérent. Les coefficients η déterminés sont proches de $\eta_{cyl} = 2.05$ calculé à partir des choix naturels

$R_\infty = L_x/2$ et $r_d = w/2$, w étant l'épaisseur de l'interface. Les solutions analytiques obtenues après régression sont tracées en lignes continues sur la figure 4.5.

4.3.2 Montée pilotée par une sursaturation

Pour étudier le cas de la montée pilotée par une force motrice d'origine chimique, on impose une concentration $c_\infty \neq c_0$ sur les frontières de la simulation (voir schéma 4.6.a). Dans ce cas, la vitesse de montée dans le régime stationnaire est plus délicate à déterminer. La vitesse est nulle au début de la simulation car les lacunes doivent d'abord diffuser de la frontière extérieure vers le cœur de la dislocation avant que la dislocation ne commence à monter. Par la suite, la vitesse augmente progressivement au cours du régime transitoire et devrait atteindre asymptotiquement un régime stationnaire où la vitesse se stabilise. Dans nos simulations, un tel régime n'est pas atteint car les interactions avec les images périodiques influencent la vitesse de la dislocation. Pour obtenir une estimation de la vitesse stationnaire, on suit l'évolution de l'accélération de la dislocation au cours du temps (pointillés sur la figure 4.6). Son évolution présente un minimum au delà duquel les interactions élastiques avec les images périodiques deviennent prédominantes. On considère que la vitesse stationnaire est donnée par la vitesse à cet instant. Toutefois, l'examen de la figure 4.7 montre que cette méthode est très approximative.

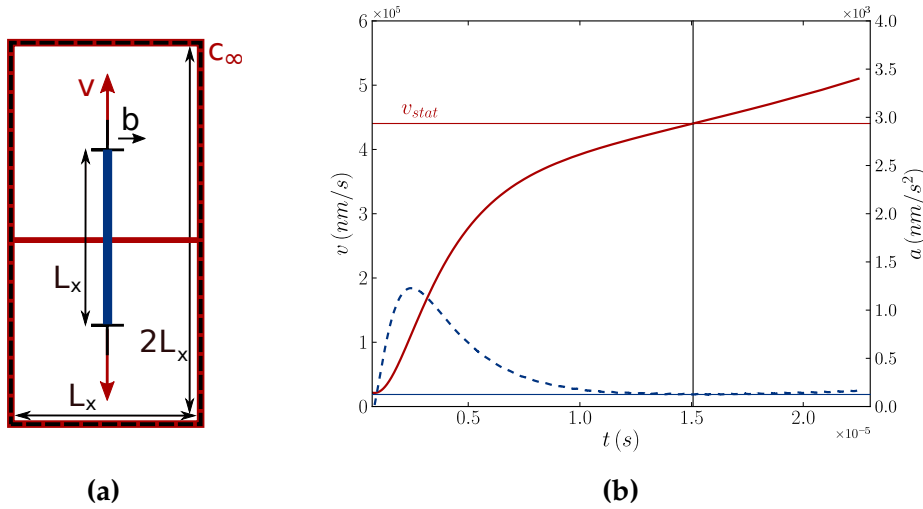


FIGURE 4.6 – (a) Schéma de la configuration dans le cas d'une sursaturation en lacunes $c_\infty = 1.5 c_0$. (b) Détermination de la vitesse stationnaire (voir texte) à partir de l'évolution de la vitesse de la dislocation (en rouge) et de son accélération (en pointillés bleus).

La figure 4.7 présente les vitesses de montée ainsi déterminées (points) en fonction de la sursaturation en lacunes et de la valeur du paramètre $\bar{L}$. Les comportements limites attendus sont retrouvés. Pour $\bar{L} \gg 1$, on trouve bien un comportement linéaire en c_∞/c_0 comme prévu par la solution de l'équilibre local. Pour $\bar{L} \ll 1$, les résultats numériques s'approchent d'une allure logarithmique comme prévu par l'équation 4.34.

Comme précédemment, on effectue une régression non linéaire aux moindres carrés avec comme seul paramètre ajustable le facteur géométrique η . La solution ainsi déterminée est tracée en lignes continues sur la figure 4.7. Les écarts entre les résultats analytique et numériques sont plus importants que dans le cas d'une contrainte appliquée car l'incertitude portant sur la détermination de la vitesse de montée stationnaire est plus grande. La comparaison reste cependant très satisfaisante.

Le tableau 4.4 présente les résultats de la régression pour 3 températures différentes.

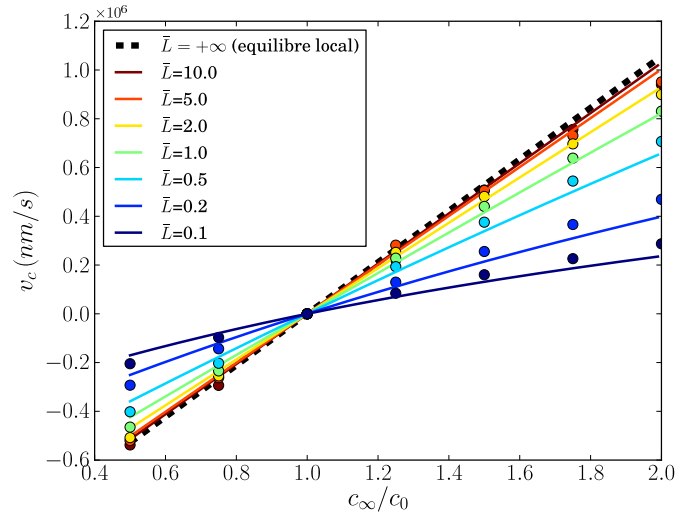


FIGURE 4.7 – Vitesses de montée à $T = 800$ K en fonction de la concentration en lacunes imposées à la frontière pour différentes valeurs du paramètre $\bar{L}$ issues des simulations (points) et de la solution analytique de l'équation 4.32 (lignes continues). La solution obtenue avec l'hypothèse de l'équilibre local (équation 4.7) est représentée en pointillés noirs.

Le coefficient géométrique η est encore une fois proche de $\eta_{cyl} = 2.05$ calculé en géométrie cylindrique à partir des choix naturels $R_\infty = L_x/2$ et $r_d = w/2$.

	$T = 700$ K	$T = 800$ K	$T = 900$ K
η	2.43	2.31	2.40
R^2	0.995	0.995	0.996

TABLE 4.4 – Résultats des régressions effectuées à différentes températures : le paramètre η et le coefficient de détermination R^2 .

Finalement, le modèle reproduit bien les comportements prévus par le développement analytique quelle que soit la force motrice (contrainte appliquée ou sursaturation) et quel que soit le régime cinétique considéré, contrôlé par la diffusion ($\bar{L} \gg 1$) ou par l'absorption/émission des lacunes ($\bar{L} \ll 1$). En particulier, pour $\bar{L} \gg 1$, les résultats numériques se rapprochent de la solution analytique dérivée dans l'hypothèse de l'équilibre local, ce qui était attendu puisque ce modèle est cohérent avec les approches précédentes.

4.4 Influence des interactions élastiques entre lacunes et dislocations

Un des avantages de l'approche champ de phase réside dans sa capacité à prendre en compte naturellement les interactions élastiques dans un cadre thermodynamique cohérent. Cette section s'attache à étudier l'influence des interactions élastiques entre lacunes et dislocation (c'est-à-dire l'influence du paramètre V^*) sur la vitesse de montée d'une dislocation isolée.

Ces interactions entre les défauts ponctuels et les dislocations est un sujet largement abordé dans la littérature. En effet, les contraintes générées dans le voisinage d'une dislocation sont à l'origine d'une concentration importante de défauts ponctuels qui impacte la mobilité de la dislocation (effet Portevin-Le-Chatelier (Friedel 64)) et facilite la nucléation de précipités (Cahn 57, Ham 59).

Dans un article de revue, Bullough et al. (Bullough 70) énumèrent les interactions de différentes natures entre défauts ponctuels et dislocations. En plus de l'effet de taille du premier ordre, les auteurs notent l'interaction de taille du second ordre (élasticité

non linéaire), l'influence des effets d'inhomogénéité (modification locale des constantes élastiques), ainsi que les interactions d'origine électrique et chimique. Dans notre étude, on négligera toutes les interactions de second ordre face à l'effet de taille. Les simulations atomiques (Clouet 06) portant sur les métaux CFC (Al, Cu, Au, Ni) montrent que cette approximation est valable hormis dans le cœur de la dislocation où les effets d'inhomogénéité et d'interaction chimique avec la faute d'empilement peuvent devenir importants.

On note V_v le volume de la lacune une fois relaxé et V^* l'écart par rapport au volume atomique $V^* = V_v - \Omega$. Dans l'aluminium, la présence de lacunes conduit à une relaxation élastique relativement importante. Ainsi, le volume V^* obtenu par des calculs *ab initio* est compris entre 30% et 40% du volume atomique (Carling 00, Nazarov 12). Des mesures expérimentales conduisent à la même fourchette de valeurs (Emrick 69). Dans notre étude, on utilisera la borne supérieure de 40%, soit $V^* = -6,6 \text{ \AA}^3$.

4.4.1 Concentration à l'équilibre

Le champ de concentration en lacunes à l'équilibre autour d'une dislocation peut être déterminé facilement. Le travail de l'énergie élastique associée à une contraction volumique cV^* (due à une concentration c en lacunes) s'exprime simplement en fonction de la pression isostatique $W = cV^*p$. La concentration des lacunes à l'équilibre dans un champ de pression est obtenue en annulant la dérivée de l'énergie totale par rapport à c :

$$E_f - kT \ln(c) + pV^* = 0 \quad \text{d'où} \quad c_{eq}(r, \theta) = c_0 \exp\left(-\frac{p(r, \theta)V^*}{kT}\right) \quad (4.35)$$

où $c_0 = \exp(-E_f/kT)$ est la concentration à l'équilibre en l'absence de pression. Dans le cas d'une dislocation coin isolée dans un volume élastiquement isotrope, le champ de pression est bien connu et s'écrit en coordonnées cylindriques comme :

$$p(r, \theta) = \frac{\mu b}{3\pi} \frac{1 + \nu}{1 - \nu} \frac{\sin \theta}{r} \quad (4.36)$$

Afin de vérifier que notre modèle reproduit bien le profil de concentration en lacunes, on réalise une simulation à $T = 800 \text{ K}$ sans contrainte appliquée. La figure 4.8.a représente le champ de lacunes autour de la dislocation une fois l'équilibre atteint. La figure 4.8.b représente le profil de concentration le long l'axe y et la solution analytique de l'équation 4.35. Les divergences en contrainte et en concentration au niveau du cœur sont évitées grâce au caractère diffus du champ de phase. En dehors du cœur de la dislocation, le modèle reproduit très bien le champ de concentration à l'équilibre autour de la dislocation.

Proche du cœur de la dislocation, la solution analytique diverge, ce qui n'est pas réaliste. On peut comparer les énergies d'interaction lacunes/dislocations avec des calculs atomiques (Clouet 06). Dans le cas de l'aluminium, Clouet montre que l'énergie d'interaction est minimale dans le premier plan atomique au-dessus de la dislocation et vaut -0.181 eV . Dans le premier plan inférieur ainsi que dans le deuxième plan supérieur, les énergies d'interaction sont de l'ordre de 0.08 eV et -0.08 eV respectivement. Dans nos simulations, on trouve des énergies d'interaction maximales de $\pm 0.11 \text{ eV}$ dans le voisinage de la dislocation. Ainsi, en tenant compte uniquement de l'effet de taille des lacunes et malgré le caractère diffus de l'interface et l'absence de dissociation des dislocations, on reproduit bien des énergies d'interaction du bon ordre de grandeur proche du cœur de la dislocation.

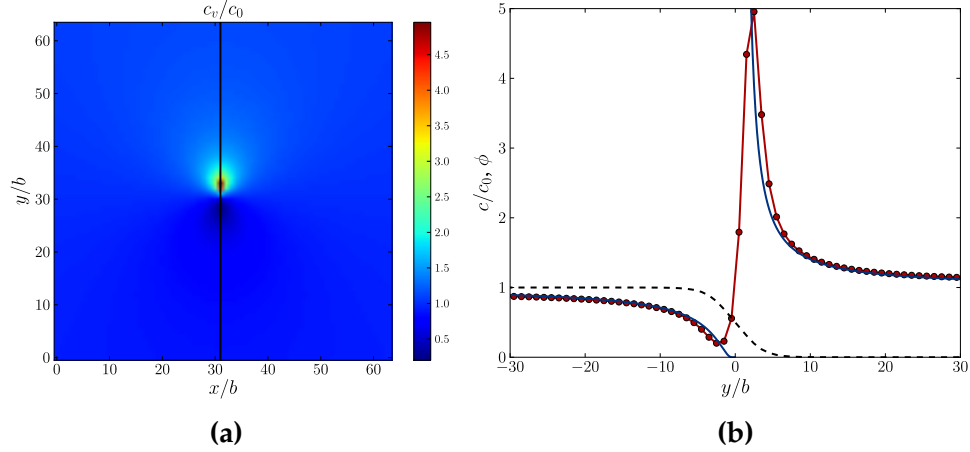


FIGURE 4.8 – (a) Concentration en lacunes normalisée c_v/c_0 autour d'une dislocation coin. (b) Coupe selon l'axe y montrant la solution analytique (bleu), la solution numérique pour la concentration (rouge) et le champ de phase ϕ (pointillés noirs).

4.4.2 Influence sur la vitesse de montée - approche analytique

L'influence des interactions élastiques sur la vitesse de montée peut être traitée analytiquement dans le cas d'une dislocation isolée. L'approche, similaire à celle présentée dans la section 4.1.1, consiste à calculer la distribution de lacunes en régime stationnaire et à intégrer le flux de lacunes arrivant au cœur de la dislocation. Cette solution analytique issue de (Margvelashvili 74) consiste en une variante du calcul de Ham (Ham 59) traitant de manière plus élégante les conditions aux limites.

On considère une dislocation isolée située au centre d'un cylindre creux de rayons r_d et R_∞ . En présence d'interactions élastiques, l'équation de diffusion en régime stationnaire s'écrit :

$$\nabla \left(c \nabla \left[\frac{kT}{\Omega} \ln \left(\frac{c}{c_0} \right) + \frac{pV^*}{\Omega} \right] \right) = 0 \quad (4.37)$$

où le terme entre crochets désigne le potentiel chimique des lacunes en présence d'élasticité. On introduit une longueur caractéristique R_0 , souvent désignée sous le terme de "rayon de capture".

$$R_0 = \frac{\mu b V^*}{3\pi kT} \frac{1+\nu}{1-\nu} \quad (4.38)$$

En notant que le potentiel d'interaction élastique est harmonique (c'est-à-dire $\Delta \frac{\sin \theta}{r} = 0$), on peut finalement écrire :

$$\Delta c + \nabla c \cdot \nabla \frac{R_0 \sin \theta}{r} = 0 \quad (4.39)$$

Afin de définir des conditions aux limites sur la frontière extérieure, on suppose que les interactions élastiques sont négligeables en $r = R_\infty$ et on impose $c(R_\infty, \theta) = c_0$. En $r = r_d$, on suppose qu'il y a équilibre local entre la population de lacunes et la dislocation. Dans le cas d'une contrainte appliquée qui conduit à une force de Peach et Koehler F_{pk} dans la direction de montée, on a :

$$\frac{F_{pk}\Omega}{b} = kT \ln \left(\frac{c_d}{c_0} \right) + \frac{kTR_0 \sin \theta}{r_d} \quad \text{soit} \quad c_d = c_0 \exp \left(\frac{F_{pk}\Omega}{kTb} - \frac{R_0 \sin \theta}{r_d} \right) \quad (4.40)$$

La résolution de l'équation 4.37 soumise à ces conditions aux limites, ainsi que la dérivation du flux de lacunes et de la vitesse de montée, sont détaillées dans l'annexe A.5. On obtient finalement une vitesse de montée qui s'exprime au moyen des fonctions de Bessel modifiées I_0 et K_0 :

$$v = \frac{2\pi D_v c_0}{b} \left(\frac{c_\infty}{c_0} - e^{\frac{F_{pk}\Omega}{kTb}} \right) \frac{I_0\left(\frac{|R_0|}{2r_d}\right)}{K_0\left(\frac{|R_0|}{2R_\infty}\right) I_0\left(\frac{|R_0|}{2r_d}\right) - I_0\left(\frac{|R_0|}{2R_\infty}\right) K_0\left(\frac{|R_0|}{2r_d}\right)} \quad (4.41)$$

La forme obtenue est proche de celle de l'équation 4.7 obtenue en l'absence d'interactions élastique. On peut d'ailleurs montrer que cette expression tend vers l'équation 4.7 pour $R_0 \rightarrow 0$. En effet, les développements limités au premier ordre de $I_0(x)$ ⁶ et de $K_0(x)$ ⁷ permettent de montrer que le rapport de fonctions de Bessel dans l'équation 4.41 tend bien vers $1/\ln(R_\infty/r_d)$ lorsque $R_0 \rightarrow 0$. Au lieu de manipuler la valeur absolue de la vitesse, on travaillera avec le rapport noté κ entre la vitesse de l'équation 4.41 et la vitesse obtenue en négligeant les effets élastiques (équation 4.7) :

$$\kappa = \frac{\ln\left(\frac{R_\infty}{r_d}\right) I_0\left(\frac{|R_0|}{2r_d}\right)}{K_0\left(\frac{|R_0|}{2R_\infty}\right) I_0\left(\frac{|R_0|}{2r_d}\right) - I_0\left(\frac{|R_0|}{2R_\infty}\right) K_0\left(\frac{|R_0|}{2r_d}\right)} \quad (4.42)$$

Il est possible de montrer que quel que soit R_0 et $R_\infty > r_d$, $\kappa > 1$. Ainsi, la prise en compte de l'élasticité des lacunes conduit à une accélération de la vitesse de montée. On peut également noter que le rapport κ est très dépendant des rapports entre les longueurs R_∞ , R_0 et r_d . Ainsi, l'ampleur de l'influence de l'élasticité dépend des dimensions du problème.

Si on suppose que l'on a trois échelles de longueurs bien distinctes $R_\infty \gg R_0 \gg r_d$, les développements limités en $+\infty$ de $I_0(x)$ ⁸ et $K_0(x)$ ⁹ permettent de simplifier le rapport des fonctions de Bessel pour obtenir une approximation plus simple à manipuler (Mordehai 11) :

$$\kappa = \frac{\ln(R_\infty/r_d)}{\ln(2R_\infty/|R_0|)} \quad (4.43)$$

Toutefois, notons que pour les paramètres utilisés ici, R_0 est du même ordre de grandeur que r_d et cette simplification n'est pas valable. Dans la suite de cette section, on ne considérera donc que la forme complète de l'équation 4.42.

4.4.3 Simulations champ de phase et résultats contradictoires

Nous avons effectué des simulations champ de phase afin de caractériser l'influence de l'élasticité sur la vitesse de montée et de comparer les résultats obtenus à l'approche analytique du paragraphe précédent. Pour réduire les temps de calcul et pour exacerber les effets dus à l'élasticité, on effectue des simulations de dimensions $18.24 \times 36.48 \text{ nm}^2$, plus petites que précédemment.

On a vu dans la section 4.2.2 que l'élasticité a une légère influence sur la structure de l'interface du champ ϕ , c'est-à-dire sur la structure de cœur de la dislocation. L'ajout de la contribution des lacunes sur l'élasticité conduit à une modification de la structure

6. Développement limité en 0 : $I_0(x) = 1 + O(x^2)$

7. Développement limité en 0 : $K_0(x) = \ln(2/x) - \gamma_e + O(x^2)$ (γ_e désigne la constante γ d'Euler)

8. Développement limité en $+\infty$: $I_0(x) = \frac{e^x}{\sqrt{2\pi x}} + O\left(\frac{e^x}{x^{3/2}}\right)$

9. Développement limité en $+\infty$: $K_0(x) = e^{-x} \sqrt{\frac{\pi}{2x}} + O\left(\frac{e^{-x}}{x^{3/2}}\right)$

d'interface du fait des fortes concentrations en lacunes autour de la dislocation. Pour s'affranchir de cet artefact dû à la description de la dislocation au moyen d'un champ diffus, on choisit d'augmenter artificiellement l'énergie d'interface. Ainsi, la structure de l'interface conserve son profil en tangente hyperbolique en l'absence comme en présence d'interactions élastiques lacunes/dislocations. De plus, il faut souligner qu'une telle modification n'a aucune influence sur la vitesse de montée de dislocations non courbées considérées ici.

A l'état initial, on suppose que les lacunes sont à l'équilibre avec le champ de contrainte de la dislocation. Après une première résolution de l'équilibre mécanique, on impose la concentration $c(r) = c_0 \exp[-p(r)V^*/kT]$ où $p(r)$ désigne la pression iso-statique. Comme précédemment, la concentration est maintenue à l'équilibre sur les frontières du système ainsi que sur une ligne horizontale séparant les dislocations.

On impose des contraintes de cisaillement de 100 MPa au système. Pour différentes températures et différents coefficients L , on effectue deux simulations, l'une avec $V^* = 0$ et la seconde avec $V^* = -6.6 \text{ \AA}^3$. On calcule ensuite le ratio κ entre les vitesses stationnaires. La figure 4.9.a représente le rapport κ en fonction de la température et du coefficient sans dimension $\bar{L}$. Premièrement, on constate qu'en accord avec ce que prédit la solution analytique, l'influence du volume V^* sur la vitesse de montée est relativement faible (de l'ordre de 10-15%) et décroît lorsque la température augmente. On retrouve également le fait que le rapport κ ne dépend pas du signe de V^* (voir figure 4.9.b). En revanche, il n'aura pas échappé au lecteur attentif que nos simulations prédisent une tendance inverse de celle de la solution analytique. Quel que soit la valeur de $\bar{L}$, nos simulations indiquent que les interactions élastiques conduisent à un ralentissement de la vitesse de montée. On peut noter que cet effet devient plus important lorsque $\bar{L}$ augmente, c'est-à-dire lorsqu'on s'approche du cas limite où l'absorption/l'émission de lacunes au niveau du cœur est instantanée.

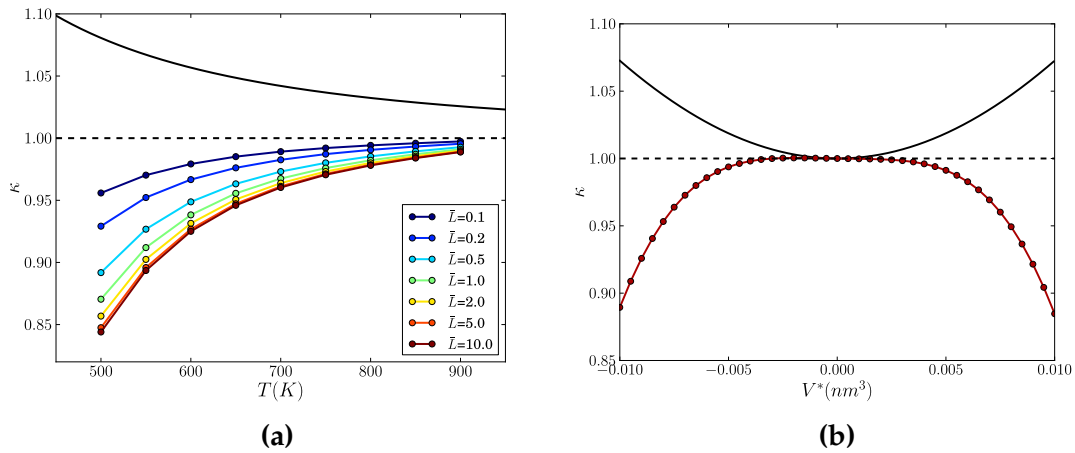


FIGURE 4.9 – (a) Rapport κ entre la vitesse avec ($V^* = -6.6 \text{ \AA}^3$) et sans ($V^* = 0$) interactions élastiques pour différentes températures. Solution analytique (équation 4.42) en noir, et résultats des simulations pour différentes valeurs de $\bar{L}$. (b) Rapport κ en fonction de V^* pour $T = 800$ K et $\bar{L} = 10$.

Afin d'expliquer cette tendance, de nombreux tests ont été effectués. On a ainsi pu écarter tout effet d'origine numérique car la modification du pas de discrétisation, du pas d'intégration et des dimensions des simulations n'ont pas montré d'influence sur cette tendance. Nous avons alors cherché une explication physique de ces résultats. En effet, notre modèle est plus riche que la solution analytique présentée précédemment. En particulier, cette dernière néglige l'influence des contraintes produites par les lacunes sur la dislocation ainsi que les interactions lacunes/lacunes. De plus, le champ

de lacunes peut générer un effet de traînée de Cottrell sur la dislocation et freiner la montée. Alors que ces effets sont naturellement pris en compte dans notre modèle, ils sont absents de l'approche analytique. Enfin, l'allure de la figure 4.9.b montre que la dépendance du rapport κ en fonction de V^* est différente de celle prédite par la solution analytique, ce qui semble indiquer la présence d'un effet supplémentaire dont la solution analytique ne tient pas compte.

Nous allons tester un à un ces effets sur la vitesse de montée afin de montrer si l'un d'eux peut compenser l'accélération prédite par l'approche analytique et expliquer les résultats obtenus.

4.4.4 Influence de l'élasticité des lacunes sur la dislocation

Dans l'approche analytique, l'influence de l'élasticité des lacunes sur la dislocation n'est pas prise en compte. Toutefois, la population de lacunes génère des contraintes sur la dislocation. En particulier, dans nos simulations, en l'absence de force motrice, la dislocation monte sous l'effet d'une contrainte non nulle provenant de la population de lacunes. Dans le cas d'un système ouvert, ce mouvement est maintenu par l'arrivée de nouvelles lacunes.

On peut estimer cette vitesse à partir de la contrainte agissant sur la dislocation. On considère une dislocation isolée au centre d'un cylindre creux de rayon interne r_d et de rayon externe R_∞ (figure 4.10). On se place dans le repère cylindrique (r, θ, z) et on suppose la population de lacunes à l'équilibre avec le champ de contrainte de la dislocation, c'est-à-dire :

$$c(r, \theta, z) = c_0 \exp\left(\frac{-R_0 \sin \theta}{r}\right) \quad (4.44)$$

où R_0 a été défini précédemment. Afin de déterminer la contrainte agissant sur la dislocation provenant des lacunes contenues dans un volume élémentaire δV , on utilise la solution d'Eshelby pour le champ lointain d'une inclusion de forme quelconque (Eshelby 57). La composante $\delta\sigma_{11}$ au centre du repère cylindrique provenant de δV s'exprime en coordonnées cylindriques comme :

$$\delta\sigma_{11} = \frac{\mu}{2\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{\varepsilon^0}{(r^2 + z^2)^{3/2}} \left(1 - \frac{3r^2 \cos^2 \theta}{r^2 + z^2}\right) \delta V \quad (4.45)$$

La déformation libre en un point du système s'écrit en fonction de la concentration en lacunes $\varepsilon^0(r, \theta, z) = c(r, \theta, z) V^* / 3\Omega$. On considère alors que la population de lacunes est à l'équilibre avec le champ de contrainte de la dislocation (équation 4.44). On obtient donc :

$$\delta\sigma_{11} = \alpha \frac{e^{-\frac{R_0 \sin \theta}{r}}}{(r^2 + z^2)^{3/2}} \left(1 - \frac{3r^2 \cos^2 \theta}{r^2 + z^2}\right) \delta V \quad \text{avec} \quad \alpha = \frac{\mu}{2\pi} \frac{1+\nu}{1-\nu} \frac{V^* c_0}{3\Omega} \quad (4.46)$$

L'intégration sur l'ensemble du cylindre creux donne :

$$\sigma_{11} = \iiint \delta\sigma_{11} = \frac{4\pi\alpha}{R_0} \left(r_d I_1\left(\frac{R_0}{r_d}\right) - R_\infty I_1\left(\frac{R_0}{R_\infty}\right) \right) \quad (4.47)$$

Pour des températures comprises entre 500 K et 900 K, l'application numérique donne des contraintes très faibles variant de $5 \cdot 10^{-4}$ MPa à 0.14 MPa, négligeables comparées à la contrainte appliquée de 100 MPa utilisée dans la section 4.4.3.

Cette contrainte provoque une montée de la dislocation qui peut être obtenue par l'équation 4.7 que l'on peut comparer avec les vitesses obtenues dans nos simulations champ de phase en l'absence de force motrice. La figure 4.10.b représente la vitesse de montée calculée à partir de nos simulations (rouge) et prédite par la solution analytique (noir). On peut déjà remarquer que la vitesse de montée décroît très rapidement avec la température et que les deux solutions (numérique et analytique) prédisent la même tendance de décroissance. Cependant, une décade de différence sépare les deux vitesses de montée sur l'ensemble de la gamme de température. Une telle différence peut s'expliquer par le fait que la solution analytique est très sensible au rayon interne r_d . En effet, étant donné la décroissance en $1/r^3$ de la contrainte issue d'une inclusion (équation 4.46), seules les lacunes présentes dans le voisinage de la dislocation jouent un rôle significatif. Or, si on réduit r_d d'une quantité δr_d , la concentration en lacunes dans ce voisinage augmente exponentiellement avec δr_d .

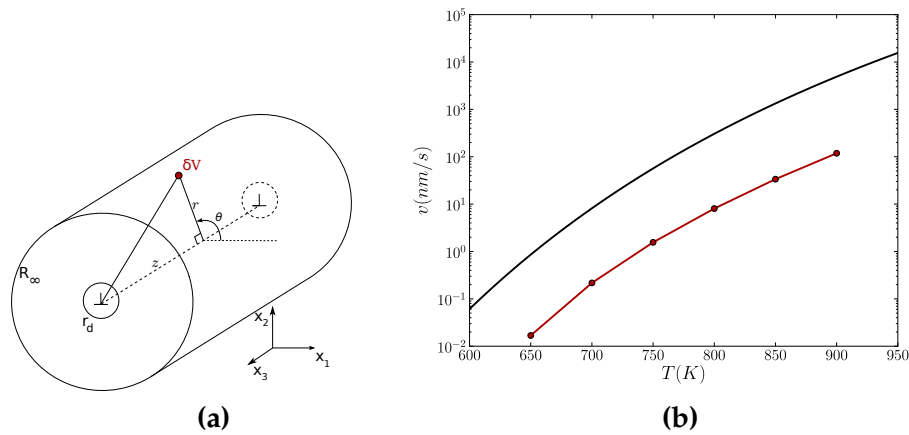


FIGURE 4.10 – (a) Repère cylindrique pour l'intégration. (b) Vitesse de montée en échelle logarithmique issue de nos simulations (rouge) et prédite par le calcul analytique (noir) avec $R_{\text{inf}} = L_x/2$ et $r_d = w/2$.

Dans le cas où une contrainte extérieure est appliquée au système, le profil de lacunes s'éloigne de l'équilibre, ce qui modifie également les contraintes provenant du nuage de lacunes et agissant sur la dislocation. Les simulations numériques montrent que ces contraintes sont du même ordre de grandeur que celle induite par une concentration de lacunes à l'équilibre, c'est-à-dire inférieures de plusieurs ordres de grandeur à la contrainte appliquée de 100 MPa utilisée précédemment. Ainsi, l'influence des contraintes provenant du champ de lacunes ne permet pas d'expliquer les résultats mentionnés dans le paragraphe 4.4.3.

On peut noter que dans d'autres situations, ces contraintes peuvent avoir une influence non négligeable. En particulier, les interstitiels dans les matériaux irradiés et les atomes de soluté possèdent un effet de taille conséquent et une concentration beaucoup plus importante que les lacunes considérées ici. Ces contraintes peuvent alors devenir non négligeables et contribuer de manière significative au processus de montée.

4.4.5 Interactions élastiques lacunes-lacunes

Même si on a vu que les lacunes produisent un champ de contrainte négligeable sur la dislocation, les interactions lacunes-lacunes peuvent altérer leur cinétique de diffusion et ralentir la vitesse de montée.

Dans le cadre de l'élasticité linéaire utilisée ici, le champ de pression isostatique en tout point de l'espace peut être décomposé en une contribution issue de la dislocation $p^d(r)$ et une contribution issue du champ des lacunes $p^v(r)$. Sous l'hypothèse où le

champ de concentration des lacunes varie lentement dans l'espace (ce qui est vrai loin du cœur de la dislocation), on peut considérer que seule la concentration locale influence la pression locale et on peut écrire :

$$p^v(r) = \frac{KV^*c(r)}{\Omega} \quad (4.48)$$

où K désigne le module de compression isostatique ("bulk modulus"). L'ajout de ce terme supplémentaire dans l'équation de diffusion conduit à une expression du type :

$$\dot{c} = D_v \nabla \cdot \left(\nabla c + cR_0 \nabla \left(\frac{\sin \theta}{r} \right) + \alpha c \nabla c \right) = -D_v \nabla \cdot J_s \quad (4.49)$$

où $\alpha = KV^{*2}/kT\Omega$ et J_s désigne le flux sortant de lacunes. Contrairement aux autres termes de l'équation, $\alpha c \nabla c$ est d'ordre 2 en c . Comme la concentration en lacunes est très faible, cette contribution peut être considérée comme négligeable comparée aux autres termes de l'équation.

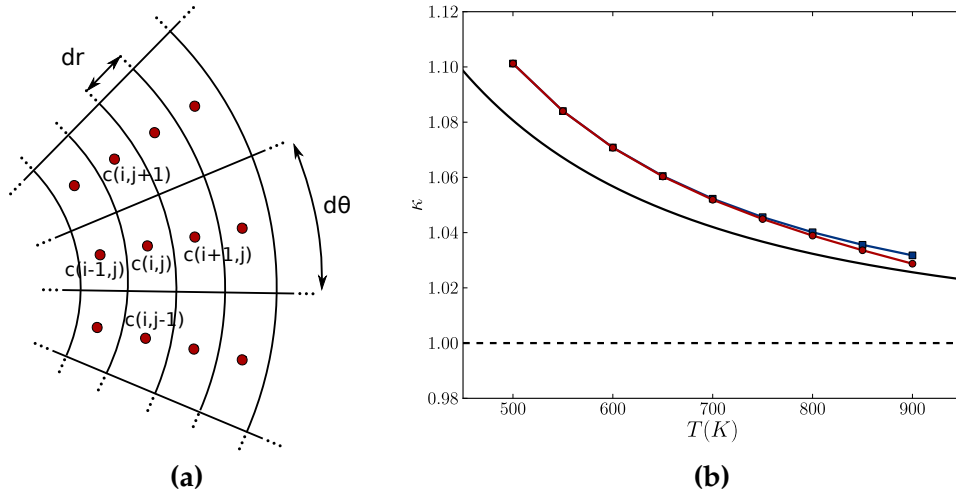


FIGURE 4.11 – (a) Discretisation de l'espace en volumes finis. (b) Rapport κ déterminé analytiquement (noir), issu des simulations en volumes finis pour $\alpha = 0$ (bleu) et pour $\alpha = KV^{*2}/kT\Omega$.

On désire néanmoins quantifier l'effet de ce terme et vérifier son caractère négligeable dans notre cas. Comme la voie analytique semble assez ardue, on choisit d'intégrer l'équation 4.49 par des moyens numériques et d'en déduire la vitesse de montée. On choisit d'utiliser une discrétisation en volumes finis avec un maillage cylindrique. En effet, cette méthode est simple à mettre en place et permet d'assurer la conservation du flux, même lorsque le maillage est à géométrie cylindrique. On considère une géométrie en cylindre creux de rayon interne r_d et de rayon externe R_∞ . On discrétise l'espace en volumes élémentaires avec un pas angulaire $\Delta\theta$ et un pas radial Δr (figure 4.11.a). Dans chaque élément, on suppose que la concentration $c_{i,j}$ est uniforme. L'intégration de l'équation 4.49 sur chaque élément de volume $V_{i,j}$ et l'utilisation du théorème de la divergence permet d'obtenir :

$$V_{i,j} \dot{c}_{i,j} = \int_{V_{i,j}} -\nabla \cdot J_s dV = \int_{S_{i,j}} -J_s \cdot n dS = - \sum_{\text{faces}} J_s S_{i,j} \quad (4.50)$$

où $S_{i,j}$ désigne les aires des faces délimitant le volume $V_{i,j}$ et n les normales sortantes. Les différents termes du flux sont ensuite déterminés simplement par différences finies

entre la concentration en (i, j) et les premiers voisins. Une fois la valeur du flux sortant connue pour chaque face, l'évolution de la concentration est obtenue à partir d'un schéma d'Euler explicite en temps :

$$c_{i,j}^{t+1} = c_{i,j}^t - \frac{dt}{V_{i,j}} \sum_{\text{faces}} J_s S_{i,j} \quad (4.51)$$

En $r = r_d$, on suppose que la population en lacune est à l'équilibre avec la dislocation, c'est-à-dire :

$$c(r_d, \theta) = c_0 e^{\frac{R_0 \sin \theta}{r_d} + \frac{\sigma^\theta \Omega}{kT}} \quad (4.52)$$

En $R = R_\infty$, la concentration est maintenue à l'équilibre :

$$c(R_\infty, \theta) = c_0 e^{\frac{R_0 \sin \theta}{R_\infty}} \quad (4.53)$$

On choisit les dimensions $R_\infty = 18.24$ nm et $r_d = 0.855$ nm. On discrétise l'espace en 10 000 éléments d'un maillage régulier ($\Delta\theta = 2\pi/100$ et $\Delta r = (R_\infty - r_d)/100$). La détermination de la vitesse de montée se fait une fois le régime stationnaire atteint, c'est-à-dire lorsque la concentration c n'évolue plus significativement. La figure 4.11 représente le rapport κ calculé pour $\alpha = 0$ et $\alpha \neq 0$. On remarque premièrement que pour $\alpha = 0$, le rapport κ est légèrement supérieur à celui déterminé analytiquement. Ceci vient des conditions aux limites en R_∞ qui sont légèrement différentes que celles utilisées pour dériver la solution analytique de l'équation 4.42. Malgré ce léger décalage, les deux solutions sont très proches l'une de l'autre. Comme attendu, l'influence du paramètre α est très faible et ne modifie que très légèrement la vitesse de montée. Son influence commence à se faire sentir aux températures élevées où ce terme d'ordre 2 en c_0 n'est pas complètement négligeable.

Toutefois, dans des situations où la concentration en défauts est significative, comme c'est le cas pour les interstitiels dans les matériaux irradiés ou pour une espèce en solution solide, l'influence de ces effets élastiques peut devenir non négligeable et affecter la diffusion des défauts autour de la dislocation de manière significative.

4.4.6 Effet de traînée de Cottrell

Lorsqu'une dislocation se déplace, le nuage de lacunes qui entoure la dislocation se déplace à la même vitesse. Cette interaction est à l'origine d'une force de traînée sur la dislocation. Cet effet est bien connu dans le cas du glissement des dislocations en présence de solutés (Cottrell 49, Hirth 68, Wang 00) mais n'a pas été étudié dans le cas de la montée des dislocations. Bien évidemment, cette contribution n'est pas prise en compte dans l'approche analytique du paragraphe 4.4.2 où la dislocation reste immobile.

Pour estimer l'ordre de grandeur de cet effet, on suit le développement de Cottrell (Cottrell 49) également détaillé dans (Hirth 68). On considère une dislocation coin de vecteur de Burgers b orienté dans la direction x et qui monte dans la direction $y > 0$ à une vitesse v_c constante. On suppose que la population de lacunes autour de la dislocation est proche de l'équilibre. Moyennant certaines approximations, la contrainte de montée effective agissant sur la dislocation et provenant de l'effet de traînée du nuage de lacunes peut s'écrire comme :

$$\sigma_{11}^{cott} = v_c \frac{\pi c_0 k T R_0^2}{2 D_v V^* b} \ln \left(\frac{x_{max}}{x_{min}} \right) \quad (4.54)$$

Du fait de la contribution en $1/r$ du potentiel d'interaction dislocation/lacunes, l'intégration ne peut pas être effectuée sur l'ensemble de l'espace et on introduit les bornes d'intégration x_{min} et x_{max} dans la direction x . Un choix naturel pour ces bornes d'intégration est r_d et R_∞ . Dans le cas où la vitesse de montée est explicitée en fonction de la contrainte appliquée au système, ces termes géométriques disparaissent et on obtient :

$$\sigma_{11}^{cott} = \left(\frac{\pi c_0}{R_0 V^*} \right)^2 \frac{kT}{b} \left(1 - e^{\sigma^a \Omega / kT} \right) \quad (4.55)$$

On remarque que cette contribution dépend du carré de c_0 , et on s'attend donc à des valeurs très faibles. Une application numérique donne $\sigma_{11}^{cott} = 9 \cdot 10^{-8} - 2.4 \cdot 10^{-2}$ MPa pour des températures $T = 500 - 900$ K et $\sigma^a = -100$ MPa. L'influence de cette contribution sur la vitesse de montée peut donc être considérée comme négligeable.

Le caractère non significatif de cet effet a été vérifié dans nos simulations en coupant l'équation dynamique sur le champ de phase ϕ . Ainsi, la dislocation continue à se comporter comme un puits ou une source de lacunes mais ne se déplace pas au cours du temps. Les résultats obtenus pour la vitesse de montée sont identiques aux simulations précédentes. Les effets reliés à l'influence du mouvement des dislocations sur la vitesse de montée apparaissent bien comme négligeables.

Les trois hypothèses avancées pour expliquer les résultats contradictoires présentées dans le paragraphe 4.4.3 s'avèrent infructueuses. En effet, les contributions dues aux contraintes générées par les lacunes sur la dislocation, aux interactions lacunes-lacunes et à un effet de traînée de Cottrell sont négligeables comparées aux différences obtenues entre les simulations champ de phase et l'approche analytique.

4.5 Montée de dislocations non isolées

Contrairement aux approches de Dynamique des Dislocations (DD) (Mordehai 08, Bakó 11, Keralavarma 12), l'approche champ de phase peut prendre en compte le profil de diffusion des lacunes dans une microstructure de dislocations complexe.

Dans cette section, nous nous attacherons à étudier des configurations plus complexes qu'une dislocation isolée et à comparer les résultats obtenus avec des solutions analytiques sur lesquelles est basée la DD. Dans la suite, les simulations sont effectuées à une température de 800 K. Étant donné que l'on souhaite comparer les résultats aux calculs DD où l'absorption/émission des lacunes au niveau de la dislocation est considérée comme instantanée, on se place dans la limite $\bar{L} \gg 1$. Pour des raisons pratiques, on choisit $\bar{L} = 5$ pour lequel les résultats obtenus sont très proches des solutions dérivées sous l'hypothèse de l'équilibre local (voir par exemple figure 4.5).

4.5.1 Influence de la distribution des dislocations

Dans un premier temps, on étudie le comportement en montée d'un couple de dislocations de même signe. On se place dans une configuration simple où les dislocations sont alignées sur un même plan de glissement et où chaque dislocation ne subit aucune contrainte de montée provenant de sa voisine (figure 4.12.a). Les dimensions du système sont 72.96×145.92 nm². La concentration est maintenue à l'équilibre aux frontières du système ainsi que sur une ligne horizontale située au centre du système (voir figure 4.12.a). On applique une contrainte de cisaillement $\sigma^a = -100$ MPa et on s'intéresse à la vitesse de montée des dislocations en régime stationnaire.

La figure 4.12.b montre la vitesse de montée en fonction de la distance séparant les dislocations, notée l . On peut remarquer que la vitesse de montée est très sensible au

paramètre l , et ce malgré le fait que les facteurs géométriques interviennent à l'intérieur d'un log dans l'équation 4.7. Une borne inférieure peut être obtenue en utilisant la formule 4.7 pour une dislocation de vecteur de Burgers $2b$ placée au centre d'un cylindre creux de rayon externe $R_\infty = L_x/2$. Une borne supérieure peut être estimée en considérant deux dislocations indépendantes, chacune placée dans un cylindre creux de rayon $L_x/4$. On peut noter que ces deux valeurs (tracées en pointillés noirs sur la figure 4.12) donnent une estimation des bornes de la vitesse de montée en fonction de l obtenue numériquement.

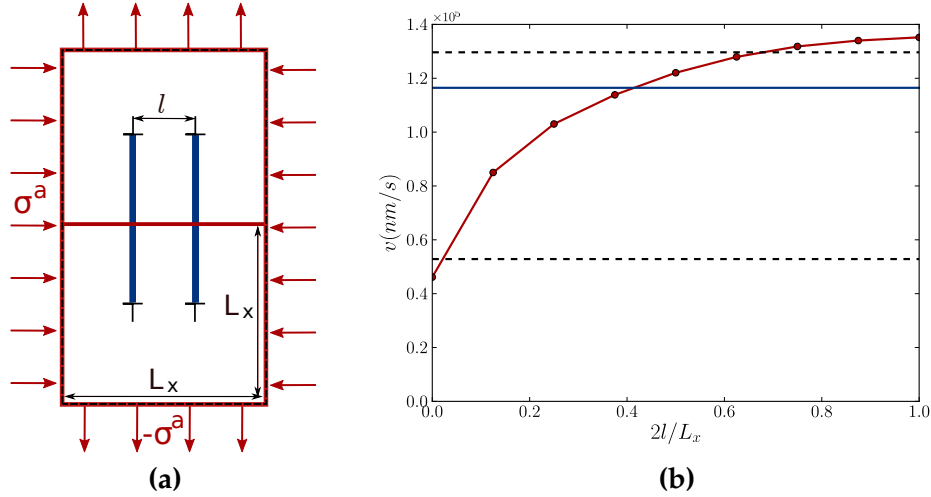


FIGURE 4.12 – (a) Configuration considérée. (b) Vitesse de montée en fonction de la distance l entre dislocations ; bornes supérieure et inférieure (pointillés noirs) et vitesse de montée obtenues avec les approximations de la DD (en bleu).

En DD, chaque dislocation est supposée être au centre d'un cylindre creux de rayon $R_\infty = 1/2\sqrt{\rho}$ où ρ est la densité de dislocations. L'utilisation de l'équation 4.7 aboutit à une estimation de la vitesse de montée de $v_{dd} = 0.97 \cdot 10^5 \text{ nm/s}$ tracée en bleu sur la figure 4.12.b. On peut remarquer que cette valeur surestime d'un facteur supérieur à 2 la vitesse de montée obtenue pour $l \simeq 0$. Cette surestimation est encore accrue lorsque l'on considère plus de deux dislocations regroupées.

4.5.2 Vers le fluage

On a vu dans le paragraphe 4.5.1 que la distribution des dislocations dans un système avait une influence importante sur la vitesse de montée. Les approches de type Dynamique des Dislocations qui ne prennent pas en compte la complexité du champ de lacunes ont tendance à surestimer ou sous-estimer la vitesse de montée suivant la distribution des dislocations (figure 4.12). On peut cependant avancer l'hypothèse que ces effets se compensent lorsqu'on considère le comportement en montée d'un grand ensemble de dislocations, comme c'est le cas lors du fluage.

Pour se rapprocher le plus possible d'une situation de fluage réaliste, on considère le cas de deux populations de dislocations se déplaçant dans deux systèmes de montée orthogonaux. Pour cela, on introduit deux champs de phase $\{\phi_1\}$ et $\{\phi_2\}$ qui décrivent les boucles de lacunes dans les deux systèmes de montée. Les équations dynamiques sur les champs $\{\phi_1\}$, $\{\phi_2\}$ et $\{c\}$ sont déduites de la même manière que dans la section 4.2 en posant $\psi = c_v + \phi_1 + \phi_2$ qui représente la population totale de lacunes dans le système.

On considère un système périodique de taille $72.96 \times 72.96 \text{ nm}^2$ dans lequel on place

aléatoirement 8 dislocations sur chaque système de montée. Ceci correspond à une densité de dislocation très élevée de l'ordre de $3 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$. Outre ce point, on peut noter que la situation est assez éloignée d'un matériau en fluage pour les raisons suivantes. On ne prend pas en compte ici le glissement des dislocations qui joue pourtant un rôle capital en fluage (Caillard 03, Keralavarma 12). De plus la distribution aléatoire de dislocations choisie ici est très éloignée d'un cas réaliste où les dislocations sont très corrélées et ont tendance à former des structures telles que des murs et des empilements.

Le système est sollicité avec une contrainte extérieure de cisaillement imposée de $\sigma_{11} = -\sigma_{22} = 100 \text{ MPa}$. On peut noter que contrairement aux autres simulations présentées dans ce chapitre, la concentration sur la frontière du système n'est pas maintenue à l'équilibre et le nombre total de lacunes (dans les boucles de dislocations et en volume) reste constant au cours du temps. Sous l'effet de la contrainte extérieure, les dislocations du premier système montent en émettant des lacunes alors que les dislocations du second système absorbent des lacunes. La figure 4.13.a représente le champ de lacunes au cours d'une telle simulation. On peut noter que les interactions entre dislocations jouent un rôle important qui s'ajoute au rôle de la contrainte appliquée. Etant donné la taille réduite du système, le comportement en fluage présente une dispersion très importante selon la configuration de dislocations considérée. Afin de s'affranchir de cette dispersion, on effectue 20 simulations présentant différentes distributions de dislocations et on effectue la moyenne de la déformation sur l'ensemble de ces simulations. La déformation ainsi obtenue est représentée en rouge sur la figure 4.13.b. On peut noter que les vitesses de déformation sont de l'ordre 10^2 s^{-1} , ce qui peut paraître colossal. Ces vitesses de déformation proviennent du choix de la densité de dislocation et de la température ($T = 800 \text{ K}$) élevées considérées dans ces simulations. Toutefois, les résultats mis en évidence dans ce paragraphe sont transposables à des températures et des densités de dislocations plus raisonnables.

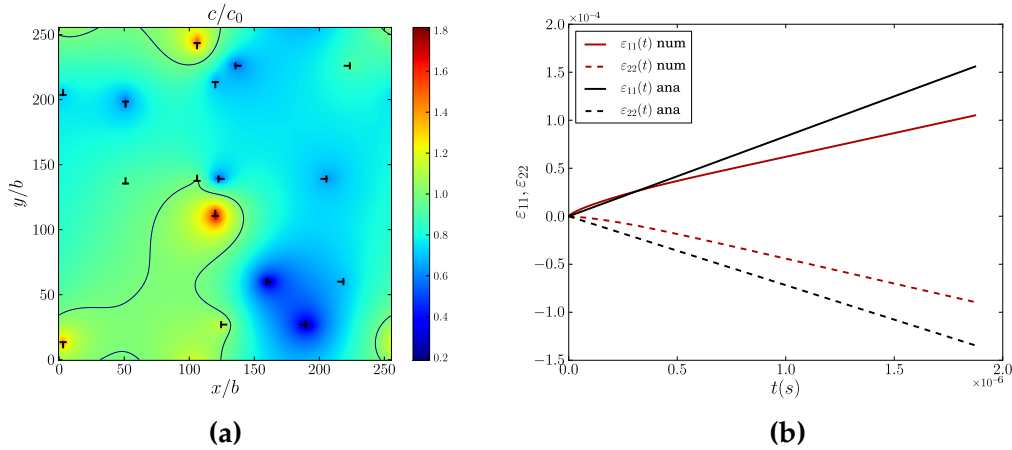


FIGURE 4.13 – (a) Champ de lacunes autour d'une population de dislocations sollicitée en cisaillement ($\sigma_{11} = -\sigma_{22} = 100 \text{ MPa}$). La ligne noire représente une courbe d'iso-concentration où $c = c_0$. (b) Déformations dans les deux directions de sollicitation en fonction du temps prédites par les simulations numériques (rouge) et par la solution analytique de l'équation 4.56 (noir).

Le comportement en fluage par montée peut être estimé très simplement en négligeant les interactions entre dislocations et en considérant que la concentration en lacunes est maintenue à l'équilibre à une distance $1/2\sqrt{\rho}$ de chaque dislocation, où ρ désigne la densité de dislocations. On considère alors que toutes les dislocations montent avec une vitesse obtenue par la formule 4.7. Finalement, la vitesse de déformation s'exprime simplement en fonction de la densité de dislocations et on obtient :

$$\dot{\epsilon} = \frac{\rho \pi D_v c_0}{\ln\left(\frac{1}{2r_d \sqrt{\rho}}\right)} \left(e^{\frac{\sigma_d \Omega}{kT}} - 1 \right) \quad (4.56)$$

Cette estimation est tracée en noir sur la figure 4.13.b. Notons tout d'abord que cette solution qui repose sur des hypothèses relativement grossières donne le même ordre de grandeur de la vitesse de déformation que les simulations. On peut remarquer que la courbe obtenue à partir des simulations prend en compte l'influence d'un régime transitoire lors des premiers instants de la simulation. Toutefois, l'étendue de ce régime transitoire est relativement réduite et la vitesse de déformation converge rapidement vers une constante reportée dans le tableau 4.5. On peut noter que la solution analytique surestime la vitesse de déformation, ce qui peut être attribué aux simplifications effectuées pour l'obtenir, en particulier la simplification apportée au champ de diffusion des lacunes. D'autre part, on remarque que les résultats issus des simulations numériques indiquent que $\dot{\epsilon}_{11} \simeq -\dot{\epsilon}_{22}$, ce qui n'est pas le cas de la solution analytique, conformément à la contribution exponentielle de la vitesse de montée en fonction de la contrainte. Or, pour que le comportement en fluage soit maintenu dans un régime stationnaire, les lacunes émises par les dislocations du premier système de montée doivent être absorbées par la seconde population de dislocations, ce qui implique nécessairement $\dot{\epsilon}_{11} \simeq -\dot{\epsilon}_{22}$.

	$\dot{\epsilon}_{11}^{stat} (s^{-1})$	$\dot{\epsilon}_{22}^{stat} (s^{-1})$
numérique	49.7	-51.5
analytique	83.3	-71.8

TABLE 4.5 – Vitesses de fluage dans le régime stationnaire obtenues par les simulations numériques et la solution analytique de l'équation 4.56.

Les simulations présentées dans ce paragraphe ont permis de montrer que, lorsque la position des dislocations est tirée aléatoirement, les approches mésoscopiques qui ne prennent pas en compte le champ de diffusion des lacunes ont tendance à surestimer la vitesse de montée et donc la vitesse de fluage. Cependant, lors de la déformation d'un matériau en fluage, la position des dislocations n'est généralement pas aléatoire du fait des corrélations spatiales très fortes. En effet, les dislocations ont tendance à former des empilements et des murs éloignés les uns des autres, dans lesquels la distance entre dislocations est souvent très faible. L'utilisation de la solution analytique naïve de l'équation 4.7 surestime davantage la vitesse de fluage dans une telle situation.

Afin de rendre les simulations DD plus quantitatives tout en s'abstenant de résoudre l'équation de Fick (ce qui peut être numériquement coûteux), on peut envisager d'améliorer l'équation 4.7 en tenant compte de la distribution locale de dislocations. On peut par exemple imaginer que le facteur géométrique $2\pi / \ln(R_\infty / r_d)$ considéré généralement comme constant peut être choisi en fonction des dislocations avoisinantes et de leur distance à la dislocation d'intérêt.

4.5.3 Annihilation d'un dipôle et influence de l'élasticité

On s'intéresse dans ce paragraphe à l'annihilation d'un dipôle de dislocations de type "boucle de lacunes" (voir encart de la figure 4.14). On considère pour cela un dipôle de longueur initiale $d_0 = 9.12$ nm placé au centre d'une boîte carrée de côté $L_x = 72.96$ nm. La concentration sur les frontières de la simulation est maintenue à l'équilibre tout au long de la simulation. Afin de tester l'influence de l'élasticité dans cette configuration, on effectue une simulation sans interactions élastiques ($V^* = 0$) et une simulation en présence d'élasticité ($V^* = -6.6 \text{ \AA}^3$). L'évolution de la distance sépa-

rant les deux dislocations au cours du temps est représentée en rouge sur la figure 4.14, en traits plein pour $V^* = 0$ et en pointillés pour $V^* = -6.6 \text{ \AA}^3$.

On remarque que la prise en compte des interactions élastiques a tendance à ralentir la cinétique d'annihilation. En plus du ralentissement mis en évidence pour une dislocation isolée (section 4.4), un autre effet apparaît dans ce cas. Du fait de la nature du dipôle, la pression locale dans le voisinage de chaque dislocation est négative, donc la concentration locale en lacunes est inférieure à la concentration à l'équilibre ($c = c_0 \exp(-pV^*/kT)$), ce qui freine la vitesse de montée.

Une solution analytique permet d'estimer la cinétique d'annihilation du dipôle en négligeant ces effets élastiques. En notant d la longueur du dipôle, chaque dislocation subit une contrainte :

$$\sigma_{11}(d) = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{1}{d} \quad (4.57)$$

On suppose alors que la montée s'effectue par la diffusion de lacunes dans un cylindre creux et que la vitesse de montée est obtenue par l'équation 4.7. En notant $\xi = \mu b \Omega / 2\pi(1-\nu)kT$ la longueur caractéristique du problème, la distance $d(t)$ est solution de l'équation :

$$\dot{d} = \frac{4\pi D_v c_0}{b \ln(R_\infty/r_d)} \left(1 - e^{\xi/d}\right) \quad (4.58)$$

L'intégration numérique de cette équation avec un schéma d'intégration explicite permet d'obtenir la cinétique d'annihilation représentée en traits pleins noirs sur la figure 4.14. La simulation diffère de la solution analytique par deux aspects. Tout d'abord, la simulation prend en compte le régime transitoire au cours duquel le champ de lacunes s'éloigne de sa configuration d'équilibre et adopte une configuration pseudo-stationnaire. Ce régime transitoire se traduit par une vitesse de montée légèrement plus importante que celle prédite par la solution analytique au début de la simulation. Deuxièmement, l'utilisation de l'équation 4.7 pour évaluer la vitesse de montée revient à négliger la forme complexe du champ de diffusion et à supposer que les champs de diffusion autour de chaque dislocation sont indépendants. Les résultats du paragraphe 4.5.1 montrent que cette hypothèse conduit à surestimer la vitesse d'annihilation, ce qui explique que la décroissance de la solution analytique soit plus rapide que pour les résultats numériques.

On peut modifier l'équation 4.58 afin de tenir compte des effets de l'élasticité sur la vitesse d'annihilation. On peut supposer que la pression locale subie par la dislocation est homogène dans un cylindre creux de rayon interne r_d et de rayon externe R_∞ . Dans ce domaine, la concentration en lacunes à l'équilibre devient donc $c_0 \exp(-pV^*/kT)$. De façon identique à celle présentée dans la section 4.1.1, la résolution de l'équation de diffusion permet de déduire une vitesse de montée de la forme :

$$v_c = \frac{2\pi D_v c_0 e^{-pV^*/kT}}{b \ln(R_\infty/r_d)} \left(1 - e^{\frac{F_p k \Omega}{kTb}}\right) \quad (4.59)$$

La cinétique d'annihilation obtenue à partir de cette nouvelle écriture de la vitesse de montée est tracée en pointillés noirs sur la figure 4.14. On constate que le processus d'annihilation est influencé significativement par ces effets élastiques. La différence entre les temps d'annihilation obtenus sont du même ordre de grandeur que ceux issus des simulations numériques. Des simulations numériques ont également été réalisées pour une configuration de type boucle d'interstitiels. Dans ce cas, la pression locale dans le

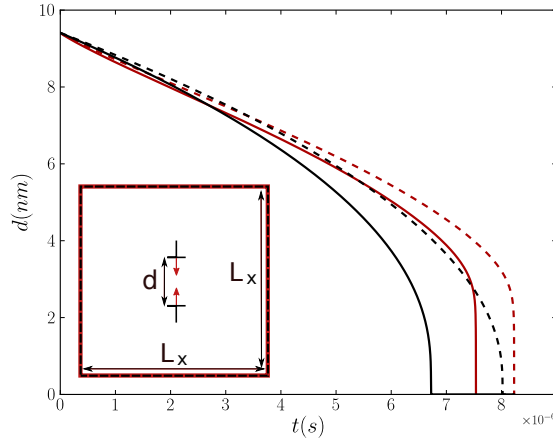


FIGURE 4.14 – Annihilation d'un dipôle de type "boucle de lacunes". Solutions analytique (noir) et résultats issus des simulations (rouge) en négligeant (traits pleins) et en tenant compte des interactions élastiques lacunes/dislocations (pointillés).

voisinage de chaque dislocation est positive et la vitesse des dislocations est plus élevée en présence d'élasticité.

Bien que l'impact de cet effet peut sembler faible dans une microstructure de dislocations éloignées les unes des autres, il devient important dans le cas où la pression présente des hétérogénéités importantes. C'est par exemple le cas pour une population de boucles prismatiques pour lesquelles la pression varie significativement d'une boucle d'interstitiels à une boucle de lacunes. C'est également le cas pour un mur fini de dislocations, car la pression peut varier de manière substantielle entre les extrémités du mur. Une hétérogénéité du champ de pression peut également provenir d'une microstructure formée par des précipités de seconde phase.

Sous l'hypothèse que le champ de pression varie peu dans l'espace, l'effet de la pression locale sur la vitesse de montée peut être facilement pris en compte dans les calculs de DD en utilisant la relation 4.59. La pression agissant sur chaque brin de dislocation peut être estimée simplement en sommant les contributions provenant de la sollicitation extérieure, de précipités de seconde phase et des autres brins de dislocations. On peut alors considérer que la pression est constante à l'intérieur d'un cylindre creux entourant chaque dislocation et utiliser la relation 4.59. Une estimation plus fine pourrait également considérer les différences de pression entre la frontière extérieure du cylindre creux et le cœur de la dislocation.

4.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons développé un modèle champ de phase pour la montée des dislocations par émission/absorption de lacunes. Les méthodes de type champ de phase sont particulièrement adaptées à l'étude des processus de montée car elles reposent sur une formulation variationnelle prenant naturellement en compte la diffusion des lacunes dans un environnement complexe, la dynamique hors-équilibre et les interactions élastiques. Un des avantages de cette formulation réside dans la prise en compte de l'aspect limitant des mécanismes d'absorption et d'émission dans le cœur des dislocations. Un coefficient dynamique L qui émerge naturellement de nos équations permet de contrôler cette cinétique d'absorption/émission au niveau du cœur de la dislocation. L'analyse du modèle présentée dans la section 4.2.2 permet de prédire la vitesse de montée d'une dislocation isolée quelle que soit la valeur de L . Nous avons vérifié que

les simulations champ de phase reproduisent bien la vitesse de montée obtenue avec cette estimation analytique.

Dans un second temps, nous avons étudié l'influence des interactions élastiques entre lacunes et dislocations sur la vitesse de montée d'une dislocation isolée. Bien que l'amplitude de l'influence de ces interactions élastiques sur la vitesse de montée concorde avec la solution analytique, les prédictions du modèle champ de phase indiquent une décélération de la montée provoquée par ces interactions alors que la solution analytique prévoit une accélération. Certaines hypothèses ont été avancées mais aucune ne permet d'expliquer ces différences.

Ce modèle permet de discuter certaines hypothèses sur lesquelles reposent la DD, de quantifier les erreurs induites par ces hypothèses et de proposer certaines pistes d'amélioration de ces techniques. Ainsi, trois pistes peuvent être envisagées afin de rendre plus quantitatives les approches basées sur la DD :

- Dans le cas d'une faible concentration en crans, l'hypothèse de l'équilibre local n'est pas valable car l'absorption/émission de lacunes au niveau du cœur de la dislocation devient limitant. Le paramètre L peut être déterminé à partir de simulations à l'échelle atomique à une certaine température. Si la détermination de ce paramètre est possible, on peut alors directement utiliser l'équation 4.32 afin de déterminer la vitesse de montée de chaque brin de dislocation.
- Dans les approches de type DD, les champs de diffusion des lacunes autour de chaque dislocation sont considérés indépendants les uns des autres. Ceci conduit à des erreurs importantes dans le cas où la microstructure est composée d'amas resserrés de dislocations. De tels amas sont très fréquents dans les matériaux déformés car les dislocations ont tendance à former des murs et des empilements de dislocations au voisinage des obstacles. Une piste d'amélioration possible de la DD serait de tenir compte de la distribution locale de dislocations et de modifier le préfacteur géométrique de l'équation 4.7 en fonction de cette distribution.
- Les approches basées sur la DD négligent également les interactions élastiques entre lacunes et dislocations. Bien que ces contributions conduisent à de faibles modifications de la vitesse de montée dans le cas de dislocations isolées, elles peuvent devenir importantes lorsque les dislocations sont soumises à une pression locale qui modifie la concentration en lacunes dans leur voisinage. Ces effets élastiques peuvent conduire à des différences significatives pour la cinétique d'annihilation de boucles prismatiques. Nous proposons de prendre en compte ces interactions élastiques en modifiant légèrement l'équation 4.7 (voir paragraphe 4.5.3).

Un des objectifs qui reste à accomplir reste bien évidemment la compréhension de l'influence sur la vitesse de montée des interactions élastiques générées par le volume de relaxation des lacunes V^* . En effet, les hypothèses proposées dans la section 4.4.2 ne permettent pas d'expliquer les résultats des simulations champ de phases. Même si cet effet reste relativement marginal dans le cas des lacunes, il devient important lorsque l'on considère la montée par absorption d'auto-interstitiels dans les matériaux irradiés (Mordehai 11) ou la diffusion d'atomes de soluté dans le champ de contraintes de la dislocation.

Une version différente de ce modèle champ de phase permet également de simuler le comportement de montée à l'échelle des crans de la dislocation. On peut en effet faire apparaître des crans en modifiant les termes de gradient dans différentes directions de l'espace. On peut alors simuler les interactions entre crans en prenant en compte la forme complexe du champ de diffusion autour de la dislocation et les interactions élastiques entre crans. Ces différentes idées sont développées dans l'annexe A.6.

Dans ce chapitre, nous avons fait le choix de considérer l'équation de diffusion des lacunes dans sa forme non-stationnaire (équation 4.19). Ceci nous permet de prendre en compte le régime transitoire de la montée des dislocations et d'étudier son influence. Toutefois, l'intégration temporelle de l'équation de diffusion des lacunes peut s'avérer coûteuse en temps de calcul. De plus, la vitesse des dislocations est toujours beaucoup plus faible que la vitesse de mise à l'équilibre du champ de lacunes. On peut considérer que celui-ci s'adapte à la configuration du champ $\{\phi\}$ de manière instantanée. On peut alors se passer de l'intégration temporelle de l'équation de diffusion en résolvant l'équation 4.19 directement en régime stationnaire ($\dot{c} = 0$) à l'aide d'une méthode numérique plus rapide que le suivi de l'équation de diffusion (méthode de point fixe par exemple). On peut ainsi faire disparaître l'échelle de temps de la diffusion et le temps caractéristique du modèle devient celui de la montée des dislocations.

CONCLUSION GÉNÉRALE

Ces travaux de thèse constituent une contribution à la modélisation des dislocations en champ de phase. Dans le chapitre 1, nous avons proposé un modèle champ de phase pour le glissement des dislocations. Un des avantages de ce modèle comparé aux approches champ de phase précédentes est qu'il ne repose pas sur des champs supplémentaires décrivant la présence des boucles de dislocations. L'énergie élastique est directement modifiée en remplaçant des contributions harmoniques par des termes périodiques en déformation. Bien que les systèmes de glissement considérés correspondent à une symétrie cubique simple, ce modèle présente l'avantage de prendre en compte naturellement le glissement dévié des dislocations ainsi que leur nucléation.

Ce modèle a été appliqué à l'étude des mécanismes de perte de cohérence par nucléation de dislocations. Les simulations ont permis de retrouver le mécanisme de nucléation de boucles prismatiques proposé par Ashby et Johnson (Ashby 69) mais également d'étudier des processus de nucléation plus complexes.

Un des avantages de modéliser le comportement des dislocations au moyen d'approches champ de phase réside dans le caractère variationnel de ces dernières. Ceci permet le couplage avec un modèle champ de phase tenant compte de l'évolution microstructurale. Dans le chapitre 3, nous avons proposé un tel modèle pour l'évolution microstructurale des précipités Al_3Sc dans les alliages Al-Sc. On a ainsi pu montrer que les dislocations peuvent influencer la morphologie des précipités ainsi que leur cinétique de croissance.

Aux échelles de temps et de températures où la microstructure d'un alliage évolue via des processus diffusifs, la montée des dislocations est activée par la diffusion de lacunes. Dans le chapitre 4, nous proposons un modèle champ de phase pour la montée des dislocations. L'avantage de ce modèle comparé aux approches précédentes consiste en l'introduction d'un paramètre dynamique contrôlant la cinétique d'absorption/d'émission de lacunes au niveau des dislocations. Une analyse du modèle a permis d'obtenir une expression analytique de la vitesse de montée quelque soit la valeur de ce paramètre et la force motrice de montée. L'influence des interactions élastiques entre dislocations et lacunes a également été étudiée, malgré le fait qu'aucune explication convaincante n'ait été apportée pour expliquer les résultats obtenus, en contradiction avec la solution analytique proposée dans (Margvelashvili 74). La montée de dislocations non isolées a également été étudiée afin de quantifier l'influence de certaines hypothèses sur lesquelles reposent les approches mésoscopiques de dynamique des dislocations.

Ces travaux de thèse ouvrent la possibilité à plusieurs perspectives dans l'étude des interactions entre plasticité et évolutions microstructurales. Le modèle d'élasticité non-linéaire peut permettre d'aborder des situations où les propriétés des interfaces matrice/précipité sont contrôlées par la présence et l'évolution de dislocations. Il peut s'agir de dislocations qui accommodent les contraintes élastiques et génèrent la perte de cohérence (comme étudiées dans les chapitres 2 et 3), mais aussi de dislocations qui rendent compte de la différence de nature cristallographique entre matrice et précipités

dans les transformations displacives. Il peut également s'agir de dislocations qui accompagnent la propagation de macles de déformation. Le modèle d'élasticité non-linéaire présenté dans cette thèse apparaît comme un outil de choix pour étudier ce type de situation.

Une autre perspective de ce travail consiste en l'incorporation du glissement et de la montée des dislocations dans un même formalisme. Un couplage direct entre les deux modèles proposés dans ces travaux de thèse n'est pas envisageable à cause du caractère diffus du cœur de la dislocation qui empêche la compatibilité des mécanismes de montée et de glissement. On peut se passer de la diffusivité des interfaces grâce à l'introduction de boucles élémentaires de dislocations (loopons) comme proposé dans (Rodney 03). Le couplage entre des loopons de glissement (déformation de cisaillement) et des loopons de montée (déformation de compression) est en principe possible dans un cadre thermodynamique cohérent (voir annexe A.7).

Un tel modèle permettrait d'étudier les mécanismes de contournement de précipités à haute température dont la montée des dislocations est un ingrédient essentiel. De plus, on pourrait également tenir compte de l'évolution microstructurale du précipité dont la morphologie peut s'adapter au champ de contrainte des dislocations et freiner la mobilité de celles-ci. Une telle étude permettrait d'obtenir des temps de contournement quantitatifs pouvant servir de données d'entrée à des modèles de plasticité mésoscopiques.

ANNEXES



SOMMAIRE

A.1	PISTE POUR LA CONSTRUCTION D'UNE ÉNERGIE PÉRIODIQUE POUR DES SYSTÈMES DE GLISSEMENT QUELCONQUES	109
A.2	COMPARAISON ENTRE LES GRILLES DIFFÉRENCES FINIES DÉCALÉES ET STANDARDS	109
A.3	CALCUL PARALLÈLE : COMPARAISON ENTRE MPI ET FFTW	111
A.3.1	Méthode 1 : Intégration semi-implicite et parallélisation en mémoire partagée	111
A.3.2	Méthode 2 : parallélisation en mémoire distribuée	112
A.3.3	Comparaison entre les deux stratégies	113
A.4	IMPLÉMENTATION NUMÉRIQUE DU MODÈLE DE MONTÉE	114
A.4.1	Intégration des équations dynamiques dans l'espace de Fourier	114
A.4.2	Résolution de l'équilibre élastique	116
A.4.3	Comparaison avec les différences finies classiques	117
A.5	CALCUL ANALYTIQUE DE LA VITESSE DE MONTÉE EN PRÉSENCE D'INTERACTIONS ÉLASTIQUES ENTRE LA DISLOCATION ET LES LACUNES	118
A.6	MODÉLISATION DE CRANS EN CHAMP DE PHASE	119
A.7	PISTE POUR COUPLER LE GLISSEMENT ET LA MONTÉE DES DISLOCATIONS EN CHAMP DE PHASE	122

A.1 Piste pour la construction d'une énergie périodique pour des systèmes de glissement quelconques

Comme vu dans le chapitre 1, l'utilisation des composantes de cisaillement du tenseur de déformation comme paramètre d'ordre conduit à l'apparition de systèmes de glissement orthogonaux. Or dans la plupart des symétries cristallines (CC, CFC, HC), les plans de glissement ne sont pas orthogonaux les uns aux autres.

Une autre approche consiste à écrire l'énergie élastique au moyen des gradients de déformation β dont les composantes sont définies comme $\beta_{ij} = \partial u_i / \partial x_j$. Considérons le cas général où on a un nombre quelconque de systèmes de glissements, chacun caractérisé par une normale n^α et un vecteur de Burgers b^α . On note h^α la distance entre les plans successifs dans la direction orthogonale au plan de glissement.

Pour chaque système de glissement, on définit un tenseur de gradient de déformation noté β^α dont les composantes sont :

$$\beta_{ij}^\alpha = \frac{b_i^\alpha n_j^\alpha}{h^\alpha} \quad (\text{A.1})$$

Le potentiel d'énergie élastique doit être construit afin de reproduire les conditions suivantes :

- On doit retrouver une énergie nulle lorsque qu'une dislocation traverse un élément de volume, c'est-à-dire lorsque celui-ci subit une déformation $n\beta^\alpha$. Pour cela, on peut utiliser le produit scalaire entre un gradient de déformation quelconque β et le tenseur β^α défini dans l'espace vectoriel des gradients de déformation :

$$\gamma^\alpha = \sum_{ij} \beta_{ij} \beta_{ij}^\alpha \quad (\text{A.2})$$

et encapsuler ce terme dans un potentiel périodique.

- D'autre part, les préfacteurs devant les termes périodiques et ceux qui conservent leur caractère harmonique doivent être choisis afin de retrouver l'énergie élastique du matériau dans la limite des faibles déformations.

Suite à quelques tentatives, nous pouvons affirmer que le point délicat de cette approche consiste à construire un potentiel périodique cohérent qui reproduit la périodicité des différents systèmes de glissement.

A.2 Comparaison entre les grilles différences finies décalées et standards

Dans cette thèse, nous utilisons un schéma numérique de type différences finies décrit dans le chapitre 1 ainsi que dans l'annexe A.4. Dans cette annexe, nous comparons ses capacités à reproduire les champs de contrainte autour d'une dislocation avec d'autres schémas numériques utilisés dans la littérature :

1. Le premier schéma considéré est couramment utilisé par les approches champ de phase (Chen 98, Bronchart 06, Gaubert 09, Cottura 13). Il consiste à définir tous les champs (contraintes, déformations, déplacements) sur une même grille (voir figure A.1.a). Le calcul d'une dérivée est alors approximé par des différences finies centrées. Par exemple, la déformation $\varepsilon_{11}(i, j, k)$ est obtenue à partir des déplacements par l'opération :

$$\varepsilon_{11}(i, j, k) = \frac{u_1(i+1, j, k) - u_1(i-1, j, k)}{2d} \quad (\text{A.3})$$

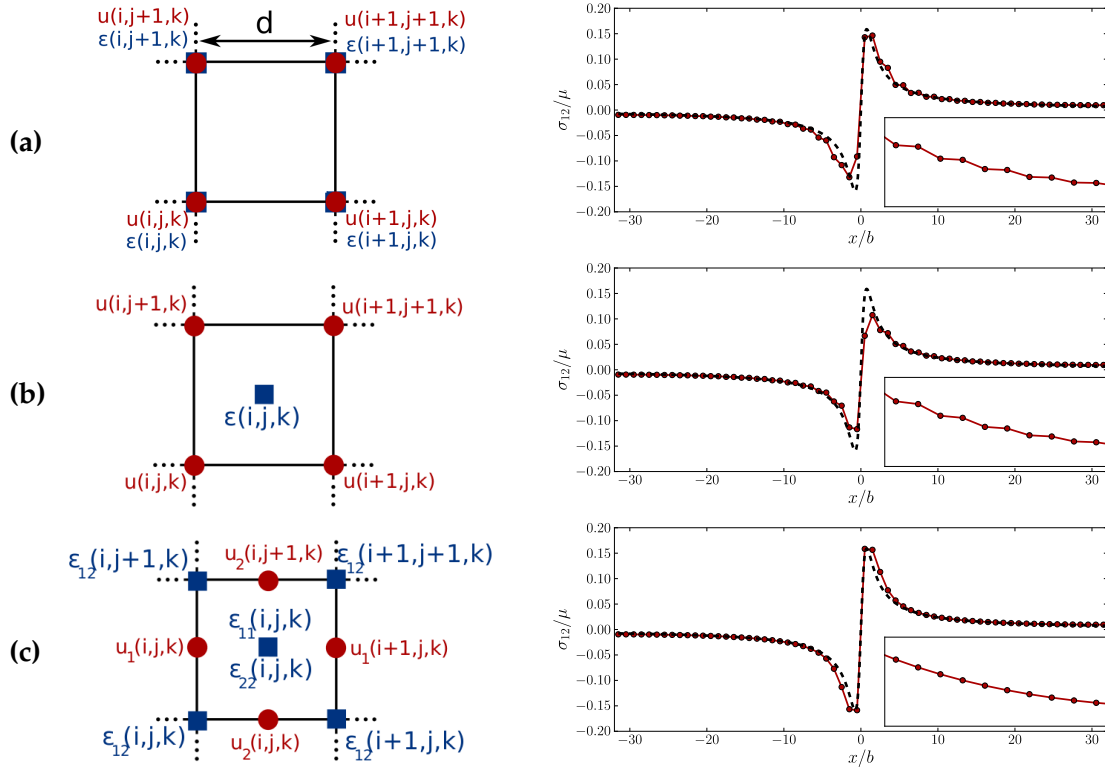


FIGURE A.1 – Schémas numériques 1 (a), 2 (b) et 3 (c) décrits dans le texte. Résolution du champ de contrainte autour d'une dislocation : solution numérique en rouge et solution analytique de Peierls-Nabarro (Hirth 68) en pointillés noirs. L'encart montre un zoom du champ de contrainte à longue distance.

où d désigne le pas de la grille.

2. Le deuxième schéma numérique est celui utilisé par Onuki et al. pour l'implémentation numérique du modèle d'élasticité périodique qu'ils développent (Onuki 03, Minami 07). Les déformations et contraintes sont calculées sur une grille différente des déplacements (voir figure A.1.b). Le calcul d'une dérivée est approximée par une différence finie moyennée entre points voisins. Par exemple :

$$\varepsilon_{11}(i, j, k) = \frac{u_1(i+1, j+1, k) + u_1(i+1, j, k) - u_1(i, j+1, k) - u_1(i, j, k)}{2d} \quad (\text{A.4})$$

3. Enfin, le troisième schéma numérique considéré est le schéma différences finies décalées utilisées dans cette thèse. En 2D, ce schéma comporte 4 grilles décalées les unes par rapport aux autres, une pour chaque composante des déplacements, une pour les composantes diagonales du tenseur des déformations et une pour la composante de cisaillement (voir figure A.1.c). Ces grilles sont agencées de telle sorte que les calculs des dérivées sont approximées par des différences finies entre premiers voisins. Par exemple :

$$\varepsilon_{11}(i, j, k) = \frac{u_1(i+1, j, k) - u_1(i, j, k)}{d} \quad (\text{A.5})$$

On peut noter que ce type de schéma différences finies est utilisé dans d'autres domaines tels que la simulation de la propagation d'ondes sonores dans des matériaux solides (Saenger 00, Zeng 01).

Afin de comparer les capacités respectives de ces différents schémas à résoudre numériquement les équations du modèle d'élasticité périodique proposé dans le chapitre 1, on introduit un dipole de dislocations et on laisse relaxer le système en utilisant les équations dynamiques 1.42. Les champs de contrainte σ_{12} obtenus après relaxation sont représentés sur la figure A.1. L'encart de chaque figure montre un zoom du champ de contrainte à longue distance. On peut noter que les différents schémas représentent le comportement du champ de contrainte de manière satisfaisante. Toutefois, pour les schémas 1 et 2, les contraintes près du cœur de la dislocation sont irrégulières et asymétriques. De plus, même loin du cœur, les contraintes présentent une forme en dents de scie persistante. Ceci est également le cas pour les champs de déformation et de déplacement. Au contraire, les champs obtenus à partir du schéma numérique 3 sont réguliers et symétriques, proche et loin du cœur de la dislocation. Bien que nous n'ayons pas étudié de manière quantitative l'influence de ces champs en dent de scie sur l'évolution d'une population de dislocations, il est clair que l'utilisation du schéma 3 est préférable afin d'éviter tout artefact d'origine numérique.

A.3 Calcul parallèle : comparaison entre MPI et FFTW

Le calcul parallèle est devenu un élément incontournable de la programmation scientifique. On peut distinguer deux stratégies différentes pour effectuer la parallélisation d'un code de calcul. Une première consiste à paralléliser certaines étapes de calcul alors qu'une autre consiste à gérer les échanges entre plusieurs instances indépendantes d'un même programme. On propose ici de comparer ces deux approches dans le cas d'un exemple simple. On souhaite intégrer au cours du temps l'équation

$$\dot{\phi} = f(\phi) + \nabla^2 \phi \quad (\text{A.6})$$

où ϕ désigne un champ de phase et $f(\phi)$ est une fonction non linéaire prise égale à $f(\phi) = -2\phi(1 - \phi)(1 - 2\phi)$. Dans les deux approches, le champ ϕ est discrétisé sur une grille différences finies régulière.

A.3.1 Méthode 1 : Intégration semi-implicite et parallélisation en mémoire partagée

Une approche communément utilisée en champ de phases consiste à intégrer l'équation A.6 au moyen d'une intégration semi-implicite dans l'espace de Fourier (Chen 98, Bronchart 06, Gaubert 09, Cottura 13). Dans l'espace réciproque, le terme $\nabla^2 \phi$ est simple à calculer car la dérivation se traduit par la multiplication par un nombre complexe iq (voir annexe A.4). De plus, la linéarité du terme de gradient permet l'utilisation d'un algorithme semi-implicite et d'un pas de temps plus large que pour une intégration explicite. Cette technique se décompose en différentes étapes :

1. Calcul du terme non-linéaire à l'instant t : $\tilde{f}^t = f(\phi^t)$
2. Calcul de sa transformée de Fourier : $\tilde{f}^t = \mathfrak{F}(f^t)$
3. Dans l'espace réciproque, la discrétisation temporelle de l'équation A.6 peut s'écrire comme :

$$\frac{\tilde{\phi}^{t+1} - \tilde{\phi}^t}{dt} = \tilde{f}^t - q^2 \phi^{t+1} \quad (\text{A.7})$$

On obtient finalement le champ ϕ à l'instant $t + 1$ par :

$$\tilde{\phi}^{t+1} = \frac{\tilde{\phi}^t + \tilde{f}^t dt}{1 + q^2 dt} \quad (\text{A.8})$$

4. Le champ ϕ^{t+1} est obtenu par transformée de Fourier inverse.

Cet algorithme nécessite le calcul de deux transformées de Fourier par pas de temps, et ces deux étapes représentent environ 90% du temps de calcul total lorsque le programme est exécuté sur un seul processeur. Une parallélisation facile à implémenter consiste à utiliser les fonctions optimisées et pré-compilées FFTW¹ multi-threads effectuant des transformées de Fourier sur plusieurs processeurs ayant accès au même espace mémoire. Finalement, les étapes 2 et 4 sont effectuées en parallèles alors que les étapes 1 et 3 sont traitées séquentiellement, ce qui peut être représenté par le diagramme de la figure A.2.

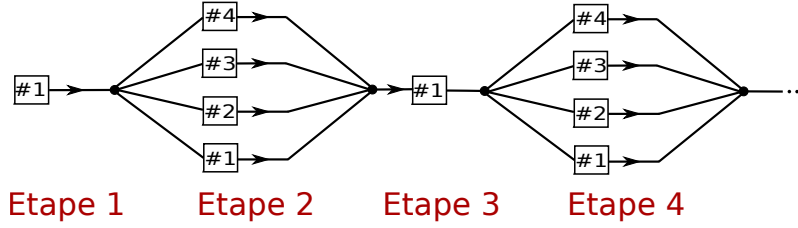


FIGURE A.2 – Diagramme représentant l'exécution d'un programme où certaines étapes de calcul (les transformées de Fourier) ont été parallélisées sur 4 processeurs.

A.3.2 Méthode 2 : parallélisation en mémoire distribuée

Une autre stratégie de parallélisation consiste à diviser le volume simulé en sous-domaines et d'attribuer chaque sous-domaine à un processeur (voir figure A.3.a). Les différents processus sont indépendants mis à part les échanges de données effectués aux endroits indiqués dans le programme. En particulier, les différents processus n'ont pas besoin d'accéder à un même espace mémoire, c'est pourquoi on parle de mémoire distribuée.

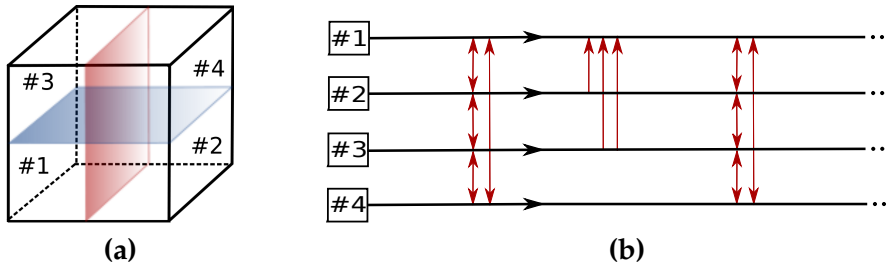


FIGURE A.3 – (a) Division en sous-domaines effectuée pour l'implémentation MPI ; chaque sous-domaine est pris en charge par un processeur (b) Diagramme représentant les échanges entre processus lors de l'exécution du programme parallélisé avec MPI

Le calcul de la transformée de Fourier d'un champ nécessite de connaître le champ sur tout le volume considéré. Ainsi l'utilisation de la stratégie d'intégration dans l'espace de Fourier nécessiterait l'échange de l'ensemble du champ ϕ entre les différents processus, ce qui serait très coûteux en temps comparé au gain que procure l'intégration semi-implicite. On réalise donc une intégration de l'équation A.6 dans l'espace direct. Le terme de gradient est calculé en différences finies entre le point d'intérêt et ses premiers voisins, ce qui nécessite d'accéder aux points des autres sous-domaines au niveau des

1. Fastest Fourier Transform in the West

interfaces. Ainsi, à chaque pas de temps, les interfaces de chaque sous-domaine sont échangées entre les processus. Ceci est réalisé au moyen de la librairie MPI (Message Passing Interface) qui permet de synchroniser les échanges entre les différents processus. La figure A.3.b représente un diagramme de l'exécution d'un programme ainsi parallélisé. L'intégration en temps est réalisée avec un schéma d'Euler explicite, ce qui nécessite l'utilisation d'un pas de temps réduit comparé à l'intégration semi-implicite.

A.3.3 Comparaison entre les deux stratégies

Afin de comparer ces deux approches, on effectue des simulations sur un système de dimensions $256 \times 256 \times 256 dx^3$. Les codes sont exécutés sur des nœuds Intel X5650 constitués de deux processeurs de 6 cœurs de calcul chacun. Chaque processeur possède un banc-mémoire commun à tous les cœurs qui le constitue.

Étant donné que les pas de temps utilisés dans les deux approches diffèrent d'un facteur 5, on choisit de comparer les ressources nécessaires pour atteindre un même temps physique $\tilde{t} = 9500$. Le temps d'exécution normalisé est représenté sur la figure A.4.

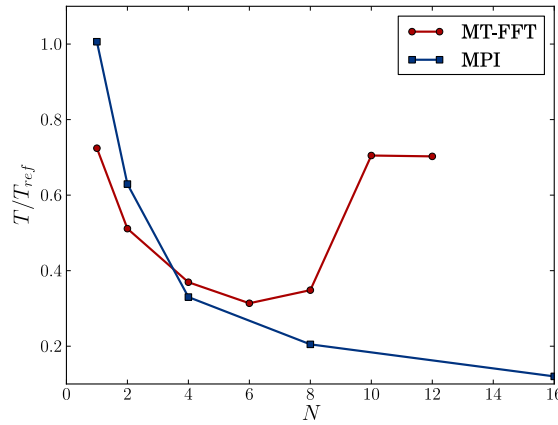


FIGURE A.4 – Temps d'exécution en fonction du nombre de cœurs alloué à chaque calcul : utilisation de l'intégration dans l'espace de Fourier faisant appel aux fonctions FFTW multi-threads (points rouges) et de l'intégration dans l'espace direct en divisant l'espace en sous-domaines (carrés bleus).

On remarque tout d'abord que, dans le cas où les codes sont exécutés sur un seul processeur, l'intégration dans l'espace de Fourier (méthode 1) est environ 25% plus rapide que la technique utilisant MPI (méthode 2). Lorsque davantage de processeurs sont alloués à l'exécution du programme, la méthode 2 rattrape rapidement son retard et devient plus rapide que la méthode 1 pour un nombre de processeur $N \geq 4$. On peut remarquer que pour $N > 6$, le temps de calcul de la méthode 1 croît avec le nombre de processeurs. Ceci est directement relié à l'architecture des nœuds de calcul. Lorsque $N > 6$, le calcul est effectué par les deux processeurs du nœud, ce qui oblige un transfert de données d'un processeur à l'autre, ce qui ralentit l'exécution du programme.

En revanche, la méthode 2 ne souffre pas d'un tel inconvénient car les différentes instances sont indépendantes les unes des autres et n'accèdent pas au même espace mémoire. Ainsi, le temps de calcul décroît toujours avec N (pourvu que N soit supérieur au nombre de points d'intégration du maillage). On peut remarquer que la décroissance du temps de calcul en fonction du nombre de processeur n'est pas en $1/N$. En d'autres termes, on ne divise pas le temps de calcul par 2 en prenant deux fois plus de processeurs. En effet, l'augmentation du nombre de processus conduit à une augmentation des échanges entre ces derniers, ce qui constitue une portion non négligeable du

temps d'exécution. Une simple régression linéaire montre que le temps de calcul évolue comme $1/N^{0.8}$.

On peut souligner que le choix de la stratégie de parallélisation dépend de l'étude que l'on souhaite réaliser. Par exemple, si l'on souhaite lancer un grand nombre de fois un même programme qui s'exécute rapidement, la méthode 1 semble la plus adaptée car elle est plus rapide sur un processeur. En revanche, si on souhaite lancer quelques simulations de dimensions très larges, l'utilisation de la méthode 2 avec un grand nombre de processeurs permet d'aboutir à des résultats beaucoup plus rapidement.

A.4 Implémentation numérique du modèle de montée

A.4.1 Intégration des équations dynamiques dans l'espace de Fourier

On réécrit les différents termes des équations 4.19 et 4.20 pour obtenir :

$$\begin{cases} \dot{c} = D + L(\mu_\phi - \mu_c) \\ \dot{\phi} = -L(\mu_\phi - \mu_c) \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

avec $\mu_c = \delta\mathcal{F}/\delta c$, $\mu_\phi = \delta\mathcal{F}/\delta\phi$ et $D = \nabla \cdot M(c)\nabla\mu_c$.

Les différents champs qui décrivent l'état du système $c, \phi, \varepsilon_{ij}, \sigma_{ij}$ sont discrétisés en espace sur une grille décalée présentée sur la figure A.5. Les champs de concentration c et le champ de phase ϕ sont discrétisés sur la grille principale (losanges verts sur la figure A.5). Les composantes du flux de concentration dans les trois directions de l'espace j_i sont calculées sur des grilles décalées représentées en rouge.

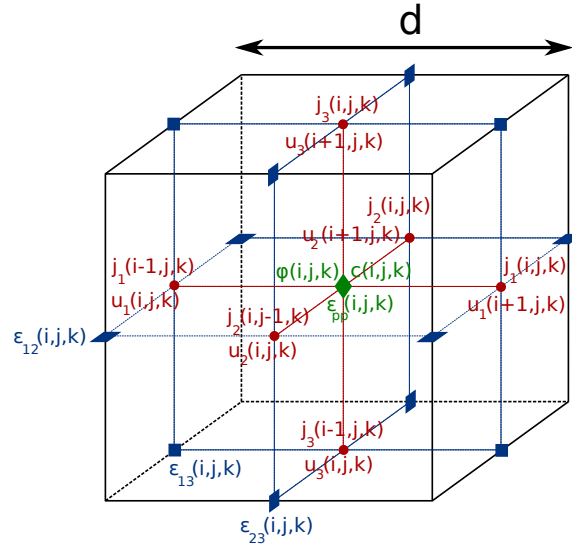


FIGURE A.5 – Schéma numérique à grilles décalées pour la diffusion

On distingue deux types de différences finies de type premier voisins : Les différences notées avec un indice "+" définies par $D_1^+ \varphi = [\varphi(i+1, j, k) - \varphi(i, j, k)]/d$ où φ représente un champ quelconque, (i, j, k) sont les indices de numérotation des points de la grille dans les 3 directions de l'espace et l'indice 1 indique la direction suivant laquelle est effectuée la différence. De même, on définit les différences notées "-" par $D_1^- \varphi = [\varphi(i, j, k) - \varphi(i-1, j, k)]/d$.

On note $\tilde{\varphi} = \mathfrak{F}(\varphi)$ la transformée de Fourier discrète d'un champ φ discretisé dans l'espace réel

$$\tilde{\varphi}(k_1, k_2, k_3) = \frac{1}{N_1 N_2 N_3} \sum_{n_1}^{N_1} \sum_{n_2}^{N_2} \sum_{n_3}^{N_3} \varphi(n_1, n_2, n_3) \exp \left(-2i\pi \left(\frac{k_1 n_1}{N_1} + \frac{k_2 n_2}{N_2} + \frac{k_3 n_3}{N_3} \right) \right) \quad (\text{A.10})$$

où les indices (n_1, n_2, n_3) courent dans l'espace réel et les indices (k_1, k_2, k_3) dans l'espace réciproque. La transformée de Fourier inverse notée $\varphi = \mathfrak{F}^{-1}(\tilde{\varphi})$ est définie par :

$$\varphi(n_1, n_2, n_3) = \sum_{k_1}^{N_1} \sum_{k_2}^{N_2} \sum_{k_3}^{N_3} \tilde{\varphi}(k_1, k_2, k_3) \exp \left(2i\pi \left(\frac{k_1 n_1}{N_1} + \frac{k_2 n_2}{N_2} + \frac{k_3 n_3}{N_3} \right) \right) \quad (\text{A.11})$$

Dans l'espace de Fourier, une différence finie s'écrit simplement comme un produit par un nombre complexe. En effet, en utilisant la définition de l'équation A.10, on a :

$$D_1^+(\tilde{\varphi}) = \frac{e^{2i\pi k_1/N_1} - 1}{d} \tilde{\varphi} = q_1^+ \tilde{\varphi} \quad \text{et} \quad D_1^-(\tilde{\varphi}) = \frac{1 - e^{2i\pi k_1/N_1}}{d} \tilde{\varphi} = q_1^- \tilde{\varphi} \quad (\text{A.12})$$

Les opérateurs q_2^+ , q_2^- , q_3^+ et q_3^- sont définis de la même manière. Ainsi la dérivée seconde $\partial^2 \varphi / \partial x_i^2$ qui intervient dans l'expression de μ_ϕ peut être calculée simplement dans l'espace de Fourier par le produit $q_i^+ q_i^- \tilde{\varphi}$.

Le calcul du terme $D = \nabla \cdot M(c) \nabla \mu_c$ nécessite plusieurs étapes de calcul. En effet, la mobilité dépend de la concentration en lacunes et le terme n'est donc pas linéaire.

- On calcule la transposée de Fourier $\tilde{\mu}_c = \mathfrak{F}(\mu_c)$ du potentiel chimique $\mu_c = \delta \mathcal{F} / \delta c$.
- Dans l'espace de Fourier, on calcule les différentes composantes du terme de gradient $\tilde{g} = \nabla \tilde{\mu}_c$ en utilisant les opérateurs différences finies définis plus haut : $\tilde{g}_i = q_i^+ \tilde{\mu}_c$.
- On effectue la transposée de Fourier inverse de chaque composante du gradient : $g_i = \mathfrak{F}(\tilde{g}_i)$. Étant donnée la différence finie qui a été appliquée à l'étape précédente, ces grandeurs ne se trouvent pas sur la grille principale où est définie la concentration mais chaque composante se trouve sur une grille décalée (ronds rouges sur la figure A.5).
- On évalue la mobilité $M(c)$ sur chaque grille décalée en interpolant entre les différents point de la grille principale. On distingue ainsi les trois valeurs de la mobilité $M_i(c)$ évaluée sur les trois grilles décalées.
- Les différentes composantes du flux de lacunes sont calculées indépendamment sur chaque grille : $j_i(r) = M_i(c(r)) g_i(r)$.
- On effectue la transformée de Fourier pour chaque composante du flux des lacunes $\tilde{j}_i = \mathfrak{F}(j_i)$.
- Enfin, l'opérateur de la divergence est appliquée sur chaque composante du flux pour obtenir $\widehat{\nabla j}_i = q_i^- \tilde{j}_i$. Du fait de la nature des différences finies utilisées dans le calcul de la divergence, le terme ∇j_i existe sur la grille principale où est défini c , ce qui est bien cohérent.

On pourrait penser que l'attention particulière qui est portée à l'existence des différents champs sur telle ou telle grille n'est pas absolument nécessaire à l'implémentation numérique du modèle. On peut montrer que ces différentes étapes sont nécessaires pour obtenir des résultats cohérents. Par exemple, si on choisit de ne pas interpoler la mobilité sur les grilles décalées, le champs de lacunes correspondant à une condition initiale symétrique (par exemple une gaussienne) subit une dérive progressive dans une direction et perd rapidement sa symétrie.

Une fois les différents termes exprimés dans l'espace de Fourier, on discrétise en temps avec un simple schéma d'Euler explicite avec un pas de temps noté dt :

$$\begin{cases} \tilde{c}^{t+1} = \tilde{c}^t + dt \left(\tilde{D}^t + L \left(\tilde{\mu}_\phi^t - \tilde{\mu}_c^t \right) \right) \\ \tilde{\phi}^{t+1} = \tilde{\phi}^t - dt L \left(\tilde{\mu}_\phi^t - \tilde{\mu}_c^t \right) \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

A.4.2 Résolution de l'équilibre élastique

La deuxième étape de l'implémentation numérique du modèle consiste à résoudre l'équilibre élastique à chaque pas de temps. L'équilibre élastique s'écrit

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad \text{avec} \quad \sigma_{ij}(r) = C_{ijkl}(\varepsilon_{kl}(r) - \varepsilon_{kl}^0(r)) \quad (\text{A.14})$$

Par simplicité, on écrit les tenseurs sous forme vectorielle $\tau = [\tau_{11}, \tau_{22}, \tau_{33}, \tau_{23}, \tau_{13}, \tau_{12}]$. La relation entre les déformations et les déplacements s'écrit au moyen d'un opérateur noté $\mathbb{D}$ dans l'espace direct et $\mathbb{Q}$ dans l'espace de Fourier défini de manière cohérente avec la grille de la figure A.5 :

$$\varepsilon = \mathbb{D}u \quad \text{ou dans l'espace de Fourier} \quad \tilde{\varepsilon} = \mathbb{Q}\tilde{u} \quad (\text{A.15})$$

avec

$$\mathbb{D} = \begin{bmatrix} D_1^+ & 0 & 0 \\ 0 & D_2^+ & 0 \\ 0 & 0 & D_3^+ \\ 0 & D_3^-/2 & D_2^-/2 \\ D_3^-/2 & 0 & D_1^-/2 \\ D_2^-/2 & D_1^-/2 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbb{Q} = \begin{bmatrix} q_1^+ & 0 & 0 \\ 0 & q_2^+ & 0 \\ 0 & 0 & q_3^+ \\ 0 & q_3^-/2 & q_2^-/2 \\ q_3^-/2 & 0 & q_1^-/2 \\ q_2^-/2 & q_1^-/2 & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.16})$$

Les contraintes sont calculées à partir des déformations :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}(\varepsilon_{kl} - \varepsilon_{kl}^0) \quad (\text{A.17})$$

Dans le cas général où toutes les composantes C_{ijkl} sont non nulles, les déformations doivent être interpolées sur les différentes grilles afin que tous les termes d'une même relation soient bien définis au même point de grille. Dans le cas simple d'un matériau isotrope (comme considéré dans le chapitre 4), cette étape d'interpolation est évitée.

La divergence des contraintes (voir équation A.14) s'écrit au moyen d'un opérateur $\mathbb{D}'$ (ou $\mathbb{Q}'$ dans l'espace réciproque) choisi de telle sorte que les différences sur les déplacements u sont centrées.

$$\mathbb{D}' = \begin{bmatrix} D_1^- & 0 & 0 & 0 & D_3^+ & D_2^+ \\ 0 & D_2^- & 0 & D_3^+ & 0 & D_1^+ \\ 0 & 0 & D_3^- & D_2^+ & D_1^+ & 0 \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbb{Q}' = \begin{bmatrix} q_1^- & 0 & 0 & 0 & q_3^+ & q_2^+ \\ 0 & q_2^- & 0 & q_3^+ & 0 & q_1^+ \\ 0 & 0 & q_3^- & q_2^+ & q_1^+ & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{A.18})$$

Ainsi, l'équation A.14 s'écrit dans l'espace de Fourier :

$$\mathbb{Q}' \mathbb{C} \tilde{\varepsilon} = \mathbb{Q}' \mathbb{C} \tilde{\varepsilon}^0 \quad (\text{A.19})$$

En utilisant la définition des déplacements, et après inversion de $\mathbb{Q}' \mathbb{C} \mathbb{Q}$, on obtient :

$$\tilde{u} = (\mathbb{Q}' \mathbb{C} \mathbb{Q})^{-1} \mathbb{Q}' \mathbb{C} \tilde{\varepsilon}^0 \quad (\text{A.20})$$

Enfin, les déformations sont déduites des déplacements grâce à la relation A.15. Finalement, les déformations dans l'espace réel s'écrivent :

$$\varepsilon = \mathfrak{F}^{-1} \left(Q(Q' C Q)^{-1} Q' C \tilde{\varepsilon}^0 \right) \quad (\text{A.21})$$

Ces déformations sont ensuite utilisées pour le calcul des grandeurs μ_c et μ_ϕ utilisées dans l'intégration des équations dynamiques.

A.4.3 Comparaison avec les différences finies classiques

Cette méthode basée sur des grilles décalées permet de résoudre l'équilibre mécanique pour des distributions de déformation libres très irrégulières, en particulier pour des plaquettes de déformation libre utilisées pour représenter les dislocations. Les méthodes de différences finies standards largement employées dans les méthodes de champ de phase définissent tous les champs sur la même grille et définissent 3 opérateurs différences finies centrées de type

$$D_1(\varphi) = \frac{\varphi(i+1, j, k) - \varphi(i-1, j, k)}{2d} \quad (\text{A.22})$$

Les opérateurs D_2 et D_3 sont définis de la même manière. L'équilibre élastique est résolu à partir de ces opérateurs de manière équivalente à celle présentée plus haut. La figure A.6 présente le champ de contrainte σ_{11} autour d'une dislocation coin issu d'une plaquette de compression d'épaisseur d (le pas de grille) placée le long de la direction y . Les résultats présentés sur la figure A.6.a et A.6.b sont obtenus à partir des deux types de résolution (classique et grilles décalées). On remarque que la résolution effectuée à partir des différences finies classiques présente des variations très fortes en dent de scie suivant la direction x . Ceci est directement lié à la configuration des déformations libres le long de cette direction. Au contraire, le schéma numérique basé sur la grille décalé permet de reproduire le champ de contrainte autour de la dislocation sans faire apparaître de tels artefacts.

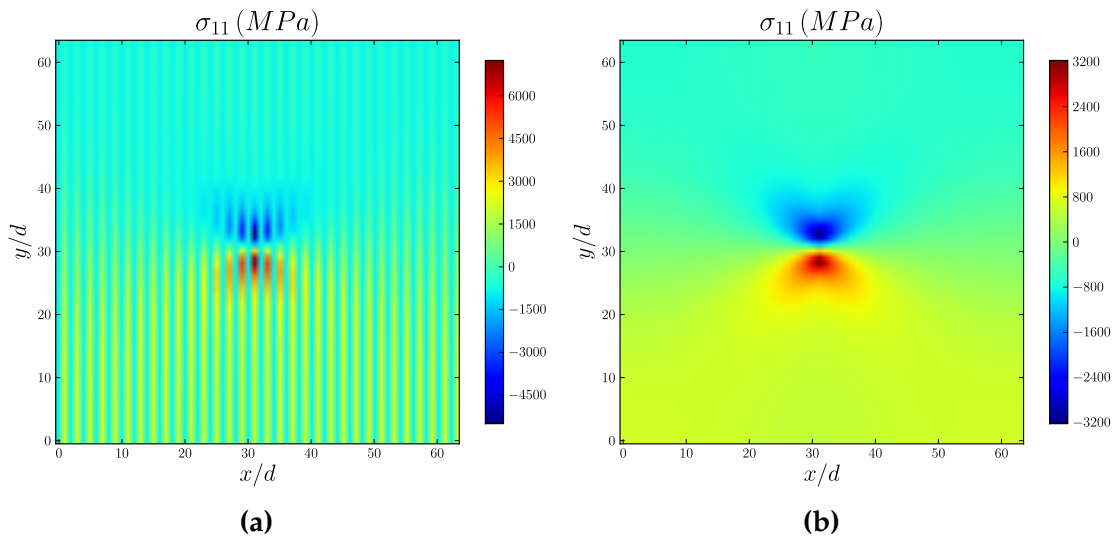


FIGURE A.6 – Champs de contrainte σ_{11} obtenus à partir de la résolution de l'équilibre élastique avec des différences finies classiques (a) et avec la grille décalée (b)

A.5 Calcul analytique de la vitesse de montée en présence d'interactions élastiques entre la dislocation et les lacunes

Dans cette annexe, on détaille le calcul analytique de la vitesse de montée lorsque les interactions élastiques dislocation/lacunes sont prises en compte. Ce calcul est basé sur la solution proposée dans (Margvelashvili 74).

L'équation de Fick stationnaire en présence d'interactions élastiques entre les lacunes et la dislocation s'écrit :

$$\Delta c + \nabla c \cdot \nabla \frac{R_0 \sin \theta}{r} = 0 \quad \text{avec} \quad R_0 = \frac{\mu b V^*}{3\pi kT} \frac{1+\nu}{1-\nu} \quad (\text{A.23})$$

Afin de déduire la vitesse de montée, on souhaite résoudre cette équation dans un cylindre creux de rayon interne r_d et de rayon externe R_∞ avec les conditions aux limites :

$$c(R_\infty, \theta) = c_\infty \quad (\text{A.24})$$

$$c_d = c_0 \exp \left(\frac{F_{pk}\Omega}{kTb} - \frac{R_0 \sin \theta}{r_d} \right) \quad (\text{A.25})$$

où F_{pk} est la force de Peach et Koehler dans la direction de montée. L'équation A.25 rend compte de l'hypothèse de l'équilibre local le long de la dislocation. On cherche le champ $c(r, \theta)$ solution de l'équation A.23 qui satisfait ces conditions aux limites. Pour cela, on effectue le changement de variables suivant :

$$c(r, \theta) = \left[c_0 e^{-\frac{R_0 \sin \theta}{r}} + Z(r, \theta) e^{-\frac{R_0 \sin \theta}{2r}} \right] e^{\frac{F_{pk}\Omega}{kTb}} \quad (\text{A.26})$$

En exprimant l'équation A.23 en coordonnées cylindriques et en y injectant la forme A.26, ce changement de variables permet d'aboutir à une équation aux dérivées partielles à variables séparées :

$$r^2 \frac{\partial^2 Z}{\partial r^2} + r \frac{\partial Z}{\partial r} - \frac{R_0^2}{4r^2} Z + \frac{\partial^2 Z}{\partial \theta^2} = 0 \quad (\text{A.27})$$

On cherche donc les solutions pour lesquelles on a séparation des variables $Z(r, \theta) = f(r)g(\theta)$. En injectant cette forme et en réorganisant les termes, on obtient :

$$\frac{r^2}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + \frac{r}{f} \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{R_0^2}{4r^2} = -\frac{1}{g} \frac{\partial^2 g}{\partial \theta^2} \quad (\text{A.28})$$

Le terme de gauche ne dépend que de la variable r alors que le terme de droite ne dépend que de θ , ils sont donc égaux à une même constante notée k . On obtient donc deux équations aux dérivées partielles séparées :

$$\frac{\partial^2 g}{\partial \theta^2} = -kg \quad (\text{A.29})$$

$$r^2 \frac{\partial^2 f}{\partial r^2} + r \frac{\partial f}{\partial r} - \frac{R_0^2}{4r^2} f = kf \quad (\text{A.30})$$

L'équation A.29 admet plusieurs types de solutions suivant la valeur de k . Toutefois, nous nous intéressons uniquement aux solutions physiques 2π -périodiques en θ qui apparaissent pour $k = n^2$ ($n \in \mathbb{N}$) et qui sont de la forme :

$$g_n(\theta) = \alpha_n \sin(n\theta) + \beta_n \cos(n\theta) \quad (\text{A.31})$$

En effectuant le changement de variables $x = |R_0|/2r$, l'équation A.30 s'écrit sous la forme d'une équation de Bessel modifiée

$$x^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + x \frac{\partial f}{\partial x} - (x^2 + n^2)f = 0 \quad (\text{A.32})$$

Cette équation admet deux types de solutions, les fonctions de Bessel modifiées de première espèce notées I_n et de deuxième espèce notées K_n . Finalement, les solutions recherchées pour $Z(r, \theta)$ prennent la forme :

$$Z(r, \theta) = \sum_{n=0}^{+\infty} \left[a_n I_n \left(\frac{|R_0|}{2r} \right) + b_n K_n \left(\frac{|R_0|}{2r} \right) \right] \sin(n\theta) + \left[c_n I_n \left(\frac{|R_0|}{2r} \right) + d_n K_n \left(\frac{|R_0|}{2r} \right) \right] \cos(n\theta) \quad (\text{A.33})$$

Un autre avantage d'avoir considéré le changement de variable relativement compliqué A.26 permet de simplifier les conditions aux limites. Ainsi, la condition aux limites en $r = r_d$ s'écrit simplement $Z(r_d, \theta) = 0$. En $R = R_\infty$, les contributions en $\exp(|R_0| \sin \theta / r)$ sont négligeables, ce qui conduit à $Z(R_\infty, \theta) = c_\infty \exp(-\Omega \sigma^a / kT) - c_0$. Une solution "simple" qui satisfait ces conditions aux limites est ² :

$$Z(r, \theta) = \left(c_\infty e^{-\frac{\sigma^a \Omega}{kT}} - c_0 \right) \frac{K_0 \left(\frac{|R_0|}{2r} \right) I_0 \left(\frac{|R_0|}{2r_d} \right) - I_0 \left(\frac{|R_0|}{2r} \right) K_0 \left(\frac{|R_0|}{2r_d} \right)}{K_0 \left(\frac{|R_0|}{2R_\infty} \right) I_0 \left(\frac{|R_0|}{2r_d} \right) - I_0 \left(\frac{|R_0|}{2R_\infty} \right) K_0 \left(\frac{|R_0|}{2r_d} \right)} \quad (\text{A.34})$$

L'étape suivante consiste à calculer le flux obtenu en dérivant le potentiel chimique suivant r :

$$J_r(r, \theta) = D_v \frac{\partial}{\partial r} \left(\ln \left(\frac{c}{c_0} \right) + \frac{|R_0| \sin \theta}{r} \right) \quad (\text{A.35})$$

L'utilisation de la relation $K_1(x)I_0(x) + I_1(x)K_0(x) = x$ permet de simplifier le calcul du flux et d'aboutir à :

$$J_r(r, \theta) = \frac{D_v (c_\infty - c_0 e^{\frac{F_{pk}\Omega}{kTb}})}{r_d} \frac{e^{-\frac{|R_0| \sin \theta}{2r_d}}}{K_0 \left(\frac{|R_0|}{2R_\infty} \right) I_0 \left(\frac{|R_0|}{2r_d} \right) - I_0 \left(\frac{|R_0|}{2R_\infty} \right) K_0 \left(\frac{|R_0|}{2r_d} \right)} \quad (\text{A.36})$$

On en déduit finalement la vitesse de montée comme l'intégrale du flux radial en r_d ³ :

$$v = \frac{2\pi D_v c_0}{b} \left(\frac{c_\infty}{c_0} - e^{\frac{F_{pk}\Omega}{kTb}} \right) \frac{I_0 \left(\frac{|R_0|}{2r_d} \right)}{K_0 \left(\frac{|R_0|}{2R_\infty} \right) I_0 \left(\frac{|R_0|}{2r_d} \right) - I_0 \left(\frac{|R_0|}{2R_\infty} \right) K_0 \left(\frac{|R_0|}{2r_d} \right)} \quad (\text{A.37})$$

A.6 Modélisation de crans en champ de phase

La montée des dislocations s'effectue par l'émission/l'absorption de lacunes au niveau de crans, des marches élémentaires le long de la ligne de dislocation. Dans le Chapitre 4, l'effet de ces crans est pris en compte via le paramètre L qui permet de

2. On peut démontrer que c'est la seule solution physique du problème en montrant que les coefficients a_n, b_n, c_n, d_n sont nuls pour $n \geq 1$. Pour cela, on isole chaque terme en multipliant par $\cos(m\theta)$ ou $\sin(m\theta)$ et en intégrant entre 0 et 2π

3. On utilise la relation $\int_0^{2\pi} e^{-\frac{|R_0| \sin \theta}{2r_d}} = 2\pi I_0 \left(\frac{|R_0|}{2r_d} \right)$

considérer le caractère limitant du processus d'attachement dans le cas où la population en crans est trop faible pour maintenir l'équilibre local entre la dislocation et la population de lacunes environnantes.

Le modèle de montée présenté dans le chapitre 4 peut être modifié afin de faire apparaître des crans le long d'une ligne de dislocation rectiligne. Cette modification ouvre la possibilité d'étudier les interactions entre crans, leur nucléation ainsi que leur rôle dans le processus de montée.

On considère une boucle de lacunes dans le plan (x, y) dont le vecteur de Burgers est orienté suivant l'axe z . La direction principale de la ligne de dislocation est orientée suivant l'axe y et les crans se présentent sous la forme de marches élémentaire dans la direction x (voir figure A.7.a). Afin de faire apparaître des crans dans les simulations, on modifie la forme de l'énergie de cœur en faisant intervenir un terme de gradient anisotrope, i.e. dont le préfacteur dépend de la direction :

$$f_{core} = A\phi^2(1 - \phi)^2 + \frac{B_1}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \frac{B_2}{2} \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 \quad (\text{A.38})$$

Les paramètres A et B_1 sont déterminés afin de reproduire une énergie de cœur de 2 eV/nm ainsi qu'une largeur de cœur de l'ordre b dans la direction x . Lorsque le modèle est discrétisé sur une grille différences finies de pas b , le cœur de dislocation est localisé sur des valeurs entières du pas de grille. Ceci correspond bien à la réalité atomique de la dislocation dont le cœur est localisée sur son plan de glissement. De plus, la taille réduite de la largeur de l'interface (comparable au pas de la grille) induit un frottement de l'interface sur le réseau, ce qui empêche l'absorption de lacunes en dehors du cran. Le paramètre B_2 est choisit pour obtenir des crans dans la direction y caractérisés par une longueur caractéristique de 1.37 nm. L'énergie d'une paire de crans ainsi obtenue est de l'ordre de quelques eV, ce qui correspond au bon ordre de grandeur (Clouet 13). Les autres termes de l'énergie du système ainsi que les équations dynamiques du système sont conservées identiques à celles présentée dans la section 4.2. Dans le cas des métaux CFC, l'évènement élémentaire d'attachement d'une lacune au niveau d'un cran de la dislocation peut être considéré comme instantané comparé à la diffusion des lacunes dans le reste du matériau. Pour s'approcher de cette séparation des échelles de temps, on choisit $\bar{L} = 5$.

A titre d'exemple, on étudie la cinétique d'annihilation d'une paire de crans. Un dipole de dislocation est introduit dans un système de taille $36.48 \times 36.48 \times 18.24 \text{ nm}^3$ et on introduit une paire de crans sur chaque dislocation (voir encart de la figure A.7.a). Sous l'effet d'une contrainte $\sigma_{33}^a = 500 \text{ MPa}$, les crans se déplacent et émettent des lacunes et finissent par s'annihiler. La température est prise égale à 900 K.

La distance séparant les crans au cours du temps est représentée en rouge sur la figure A.6. On peut comparer cette cinétique d'annihilation à une solution analytique simple. On considère que les crans n'interagissent pas entre eux et que le profil de concentration autour de chaque cran est à symétrie sphérique. L'équation de Fick en stationnaire $\Delta c = 0$ permet de déduire le champ de concentration autour d'un cran qui prend la forme :

$$c(r) = \frac{r_j}{r} (c_j - c_\infty) + c_\infty \quad (\text{A.39})$$

où r_j est un rayon de coupure de l'ordre de l'épaisseur du cran, c_j la concentration en r_j et c_∞ la concentration loin du cran. La concentration au cran c_j est déduite en considérant que la population de lacunes autour du cran (i.e. en r_j) est à l'équilibre avec

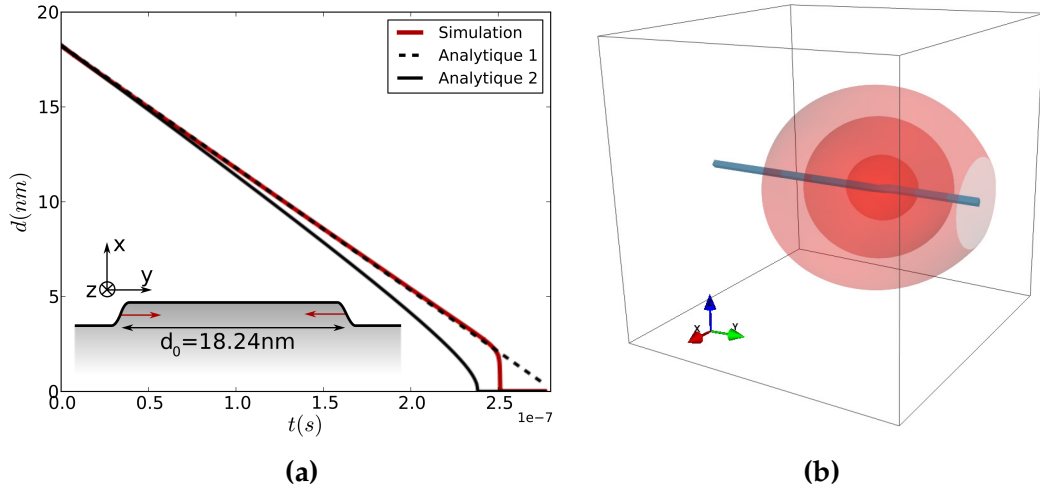


FIGURE A.7 – (a) Cinétique d’annihilation d’une paire de crans soumis à une contrainte de 500 MPa issue de la simulation champ de phases (rouge) et de deux approches numériques ; la première néglige l’énergie d’interaction entre crans (poillés noirs) alors que la seconde tient compte de cette contribution (courbe noire continue). (b) Iso-surfaces de concentration mettant en évidence l’éloignement du profil de diffusion d’une géométrie à symétrie sphérique du fait des interactions entre champs de diffusion.

la force mécanique appliquée au système. On en déduit $c_j = c_0 \exp\left(\frac{\sigma^a \Omega}{kT}\right)$. La vitesse des crans est obtenue en intégrant le flux de lacunes arrivant en r_j (Caillard 03) :

$$v_j = \pm \frac{4\pi D_v r_j c_0}{hb} \left(e^{\frac{\sigma^a \Omega}{kT}} - \frac{c_\infty}{c_0} \right) \quad (\text{A.40})$$

où h désigne la hauteur du cran et où le signe dépend du caractère du cran. Finalement, l’équation cinétique vérifiée par la distance d au cours du temps s’écrit :

$$\dot{d} = -\frac{8\pi D_v c_0 r_j}{hb} \left(e^{\frac{\sigma^a \Omega}{kT}} - \frac{c_\infty}{c_0} \right) \quad \text{d’où} \quad d(t) = d_0 - \frac{8\pi D_v c_0 r_j}{hb} \left(e^{\frac{\sigma^a \Omega}{kT}} - \frac{c_\infty}{c_0} \right) \times t \quad (\text{A.41})$$

Cette solution analytique est présentée en poillés noirs sur la figure A.7.a avec r_j choisi comme la moitié de la largeur de l’interface du champ de phase dans la direction y . On verra plus bas que l’enthousiasme que peut procurer l’excellent accord de cette solution analytique simple avec la simulation doit être modéré.

Cette approche est en effet incomplète car elle ne prend pas en compte l’énergie élastique d’interactions entre les crans. Cette énergie d’interaction est fonction de la distance séparant les crans et s’écrit simplement comme (Hirth 68) :

$$W_{int}(d) = -\frac{\mu b^2 h^2}{8\pi d(1-\nu)} \quad (\text{A.42})$$

L’équilibre au niveau de chaque cran est modifié, ce qui change la concentration c_j au niveau du cran. De la même manière que précédemment, on obtient la distance entre crans en fonction du temps :

$$\dot{d}(t) = d_0 - \frac{8\pi D_v c_0 r_j}{hb} \int_0^t \left[\exp\left(\frac{\sigma^a \Omega}{kT} + \frac{W_{int}(d(t))}{2kT}\right) - \frac{c_\infty}{c_0} \right] dt \quad (\text{A.43})$$

Cette équation est intégrée pas à pas avec un schéma d’Euler explicite et la solution est représentée en poillés noirs sur la figure A.7.a. On note que la prise en compte

de l'énergie d'interaction entre crans accélère légèrement la cinétique d'annihilation. Cette contribution peut toutefois avoir une influence bien plus importante dans le cas de contraintes appliquées plus raisonnables inférieures à 100 MPa.

Les différences qui subsistent entre la solution analytique et la cinétique de la simulation champ de phase peuvent s'expliquer en observant le champ de concentration autour des crans représentés sur la figure A.7.b. Du fait du rapprochement des crans, les champs de diffusion des lacunes interagissent et perdent leur symétrie sphérique. Tout comme l'effet étudié dans la section 4.5, ceci a tendance à ralentir la diffusion des lacunes et la vitesse des crans. Finalement, l'excellent accord entre la simulation champ de phase et la solution analytique de l'équation A.41 provient de deux effets qui ne sont pas pris en compte dans la solution analytique et qui se compensent dans cette situation : d'une part l'influence de l'énergie d'interaction qui a tendance à accélérer la cinétique et d'autre part les interactions entre champs de diffusion qui ont tendance à ralentir la diffusion des lacunes.

Pour le moment, cette approche est loin d'être quantitative car elle n'inclue pas la diffusion de cœur. Cet effet peut être pris en compte en considérant que le coefficient de diffusion dépend de l'espace et plus précisément du gradient du champ ϕ qui permet de localiser le cœur de la dislocation. L'incorporation de la diffusion de cœur permettrait d'étudier de manière réaliste le comportement de montée d'une ligne de dislocation légèrement tiltée par rapport à son plan de glissement et qui présente une distribution régulière de crans. Pour une ligne alignée suivant une direction cristallographique, la montée s'effectue via une succession d'évènements d'annihilation et de nucléation de nouveaux crans. La nucléation peut en principe être également prise en compte dans cette approche en rajoutant un terme de fluctuation thermique qui déclencherait la nucléation de crans le long de la ligne. On obtiendrait finalement un modèle capable de décrire le comportement de montée d'une dislocation de manière plus réaliste que les modèles analytiques présentés dans (Caillard 03).

A.7 Piste pour coupler le glissement et la montée des dislocations en champ de phase

Une des perspectives de ces travaux de thèse consiste à développer un modèle champ de phase tenant compte de la montée et du glissement des dislocations dans un formalisme thermodynamique cohérent. Le modèle de montée proposé dans le chapitre 4 repose sur une description des dislocations au moyen d'une interface diffuse apparaissant grâce à un terme de gradient dans la direction de montée. Ainsi, si on imagine une dislocation effectuant une combinaison de mouvements de montée et de glissement, ces termes de gradient seraient à l'origine d'une énergie résiduelle après chaque changement de comportement.

On peut se passer des termes de gradients grâce à l'introduction de loopons (Rodney 03), i.e. des boucles élémentaires de dislocations. Pour décrire le mouvement d'une dislocation en trois dimensions, on doit distinguer les loopons de glissement dont la normale n est orthogonale au vecteur de Burgers b (représentés en blanc la figure A.8) et des loopons de montée pour lesquels $n \cdot b = 0$ (en rouge sur la figure A.8).

La dynamique d'un tel système peut être inspirée de la dynamique proposée dans (Rodney 03) qui repose sur une combinaison d'équations continues et de règles locales. Il faut cependant respecter la séparation des échelles de temps entre les mécanismes de glissement et de montée, le premier étant instantané par rapport à l'autre. De plus, la gestion des transitions entre la formation de loopons de montée et de glissement nécessite également des efforts de développement.

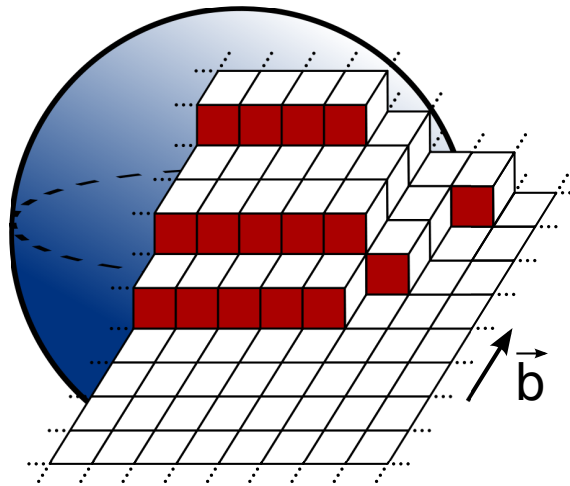


FIGURE A.8 – Mécanisme de contournement d'un précipité (en bleu) par une combinaison de mouvements de glissement et de montée décrit à l'aide de loopons de montée (rouge) et de glissement (blanc).

Ce type de modèle permettrait de coupler le glissement et la montée des dislocations dans un même formalisme champ de phase. Une application intéressante serait l'étude des mécanismes de contournement des précipités en présence de montée des dislocations. Une telle étude serait plus complète que l'utilisation de modèles de type dynamique des dislocations car elle permettrait de prendre en compte naturellement le champ de diffusion des lacunes ainsi que l'évolution du précipité dont la morphologie peut être modifiée par le champ de contrainte de la dislocation (voir chapitre 3).

BIBLIOGRAPHIE

- [Ahluwalia 01] R. Ahluwalia & G. Ananthakrishna. *Power-Law Statistics for Avalanches in a Martensitic Transformation*. Physical Review Letters, vol. 86, no. 18, p. 4076–4079, 2001.
- [Appolaire 10] B. Appolaire, E. Aeby-Gautier, J. Da Costa Teixeira, M. Dehmas & S. Denis. *Non-coherent interfaces in diffuse interface models*. Philosophical Magazine, vol. 90, no. 1-4, p. 461–483, 2010.
- [Appolaire 13] B. Appolaire & Y. Le Bouar. *Second order asymptotics of a phase field model with elasticity*. En préparation, 2013.
- [Arsenault 86] R.J. Arsenault & N. Shi. *Dislocation generation due to differences between the coefficients of thermal expansion*. Materials Science and Engineering, vol. 81, p. 175–187, 1986.
- [Ashby 68] M.F. Ashby, S.H. Gelles & L.E. Tanner. *The stress at which dislocations are generated at a particle-matrix interface*. Philosophical Magazine, vol. 19, no. 160, p. 757–771, 1968.
- [Ashby 69] M.F. Ashby & L. Johnson. *On the generation of dislocations at misfitting particles in a ductile matrix*. Philosophical Magazine, vol. 20, no. 167, p. 1009–1022, 1969.
- [Ashcroft 76] N.W. Ashcroft & N.D. Mermin. Solid State Physics. Brooks Cole, 1976.
- [Asta 98] M. Asta, S. Foiles & A. Quong. *First-principles calculations of bulk and interfacial thermodynamic properties for fcc-based Al-Sc alloys*. Physical Review B, vol. 57, no. 18, p. 11265–11275, 1998.
- [Ayas 12] C. Ayas, V.S. Deshpande & M.G.D. Geers. *Tensile response of passivated films with climb-assisted dislocation glide*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 60, no. 9, p. 1626–1643, 2012.
- [Bailey 63] J.E. Bailey. *Electron microscope observations on the precipitation of zirconium hydride in zirconium*. Acta Metallurgica, vol. 11, no. April, p. 267–280, 1963.
- [Baker 59] R.G. Baker, D.G. Brandon & J. Nutting. *The growth of precipitates*. Philosophical Magazine, vol. 4, no. 48, p. 37–41, 1959.
- [Bakó 06] B. Bakó, I. Groma, G. Györgyi & G. Zimányi. *Dislocation patterning : The role of climb in meso-scale simulations*. Computational Materials Science, vol. 38, no. 1, p. 22–28, 2006.
- [Bakó 11] B. Bakó, E. Clouet, L. M. Dupuy & M. Blétry. *Dislocation dynamics simulations with climb : kinetics of dislocation loop coarsening controlled by bulk diffusion*. Philosophical Magazine, vol. 91, no. 23, p. 3173–3191, 2011.
- [Balasubramaniam 93] R. Balasubramaniam. *Accommodation effects during room temperature hydrogen transformations in the niobium-hydrogen system*. Acta Metallurgica et Materialia, vol. 41, no. 12, p. 3341–3349, 1993.

- [Balluffi 69] R.W. Balluffi. *Mechanisms of Dislocation Climb*. Physica Status Solidi (b), vol. 31, p. 443, 1969.
- [Barnes 63] R.S. Barnes & D.J. Mazey. *Stress-generated prismatic dislocation loops in quenched copper*. Acta Metallurgica, vol. 11, p. 281–286, 1963.
- [Benoit 87] W. Benoit, M. Bujard & G. Germaud. *Kink dynamics in FCC metals*. Physica Status Solidi (a), vol. 427, p. 427, 1987.
- [Berry 06] J. Berry, M. Grant & K. Elder. *Diffusive atomistic dynamics of edge dislocations in two dimensions*. Physical Review E, vol. 73, no. 3, p. 031609, 2006.
- [Boisse 08] Julien Boisse. *Modélisation par champ de phase de la cinétique de précipitation dans les alliages Ni-Al, Al-Sc et Al-Zr-Sc*. PhD thesis, Université de Rouen, 2008.
- [Boussinot 07] Guillaume Boussinot. *Etude du Vieillissement des Superalloys à Base Nickel par Méthode de Champs de Phase*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2007.
- [Bray 02] A. J. Bray. *Theory of phase-ordering kinetics*. Advances in Physics, vol. 51, no. 2, p. 481–587, 2002.
- [Bronchart 06] Quentin Bronchart. *Développement de méthodes de champs de phase quantitatives à la précipitation homogène dans les alliages binaires*. PhD thesis, Université de Cergy-Pontoise, 2006.
- [Brown 68] L.M. Brown, G.R. Woolhouse & U. Valdre. *Radiation-induced coherency loss in a Cu-Co alloy*. Philosophical Magazine, vol. 17, no. 148, p. 781–789, 1968.
- [Brown 70] L.M. Brown & G.R. Woolhouse. *The loss of coherency of precipitates and the generation of dislocations*. Philosophical Magazine, vol. 21, no. 170, p. 329–345, 1970.
- [Bulatov 97] V.V. Bulatov & E. Kaxiras. *Semidiscrete Variational Peierls Framework for Dislocation Core Properties*. Physical Review Letters, vol. 78, no. 22, p. 4221–4224, 1997.
- [Bullough 70] R. Bullough & R.C. Newman. *The kinetics of migration of point defects to dislocations*. Reports on Progress in Physics, vol. 33, no. 1, p. 101–148, 1970.
- [Cahn 57] J.W. Cahn. *Nucleation on dislocations*. Acta Metallurgica, vol. 5, p. 169–172, 1957.
- [Cahn 58] J.W. Cahn & J.E. Hilliard. *Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy*. The Journal of Chemical Physics, vol. 28, no. 2, p. 258, 1958.
- [Caillard 03] D. Caillard & J.L. Martin. *Chapter 8 : Dislocation Climb*. In R.W. Cahn, editeur, Thermally Activated Mechanisms in Crystal Plasticity, p. 281–307. Pergamon m edition, 2003.
- [Carcione 02] J.M. Carcione, G.C. Herman & A.P.E. Ten Kroode. *Seismic modeling*. Geophysics, vol. 67, no. 4, p. 1304–1325, 2002.
- [Carling 00] K. Carling, G. Wahnstrom, T. Mattsson, A. Mattsson, N. Sandberg & G. Grimvall. *Vacancies in metals : from first-principles calculations to experimental data*. Physical Review Letters, vol. 85, no. 18, p. 3862–5, 2000.
- [Carpenter 73] G.J.C. Carpenter, J.F. Watters & R.W. Gilbert. *Dislocations generated by Zirconium hydride Precipitates in Zirconium and some of its alloys*. Journal of Nuclear Materials, vol. 48, p. 267–276, 1973.

- [Carpenter 78a] G.J.C. Carpenter. *An in-situ study of the dissolution of -zirconium hydride in zirconium*. Journal of Nuclear Materials, vol. 73, p. 190–197, 1978.
- [Carpenter 78b] G.J.C. Carpenter. *The precipitation of gamma-zirconium hydride in zirconium*. Acta Metallurgica, vol. 26, no. 8, p. 1225–1235, 1978.
- [Carpio 03a] A. Carpio & L. Bonilla. *Edge Dislocations in Crystal Structures Considered as Traveling Waves in Discrete Models*. Physical Review Letters, vol. 90, no. 13, p. 135502, 2003.
- [Carpio 03b] A. Carpio & L. Bonilla. *Oscillatory wave fronts in chains of coupled nonlinear oscillators*. Physical Review E, vol. 67, no. 5, p. 056621, 2003.
- [Carpio 05] A. Carpio & L. Bonilla. *Discrete models of dislocations and their motion in cubic crystals*. Physical Review B, vol. 71, no. 13, 2005.
- [Chen 98] L.Q. Chen & J. Shen. *Applications of semi-implicit Fourier-spectral method to phase field equations*. Computer Physics Communications, vol. 108, no. 2-3, p. 147–158, 1998.
- [Chen 10] Z. Chen, K. T. Chu, D. J. Srolovitz, J. M. Rickman & M. P. Haataja. *Dislocation climb strengthening in systems with immobile obstacles : Three-dimensional level-set simulation study*. Physical Review B, vol. 81, no. 5, p. 1–12, 2010.
- [Christian 70] J.W. Christian & V. Vitek. *Dislocations and stacking faults*. Reports on Progress in Physics, vol. 33, no. 1, p. 307, 1970.
- [Clouet 04] Emmanuel Clouet. *Séparation de Phase dans les Alliages Al-Zr-Sc : du Sant des Atomes à la Croissance de Précipités Ordonnés*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2004.
- [Clouet 05] E. Clouet, A. Barbu, L. Lae & G. Martin. *Precipitation kinetics of AlZr and AlSc in aluminum alloys modeled with cluster dynamics*. Acta Materialia, vol. 53, no. 8, p. 2313–2325, 2005.
- [Clouet 06] E. Clouet. *The vacancy–edge dislocation interaction in fcc metals : A comparison between atomic simulations and elasticity theory*. Acta materialia, vol. 54, p. 3543–3552, 2006.
- [Clouet 11] Emmanuel Clouet. *Predicting dislocation climb : Classical modeling versus atomistic simulations*. Physical Review B, vol. 84, no. 9, p. 9–11, 2011.
- [Clouet 13] E. Clouet. *Communications privées*, 2013.
- [Cottrell 49] A.H. Cottrell & M.A. Jaswon. *Distribution of solute atoms round a slow dislocation*. Proceedings of the Royal Society of London A, vol. 199, no. 1056, p. 104–114, 1949.
- [Cottura 12] M. Cottura, Y. Le Bouar, a. Finel, B. Appolaire, K. Ammar & S. Forest. *A phase field model incorporating strain gradient viscoplasticity : Application to rafting in Ni-base superalloys*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 60, no. 7, p. 1243–1256, 2012.
- [Cottura 13] Maeva Cottura. *Modélisation Champ de Phase du couplage entre évolution microstructurale et propriétés mécaniques*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2013.
- [Dash 56] W. C. Dash. *Copper Precipitation on Dislocations in Silicon*. Journal of Applied Physics, vol. 27, no. 10, p. 1193, 1956.
- [Dash 58] W.C. Dash. *Generation of prismatic dislocation loops in silicon crystals*. Physical Review Letters, vol. 1, no. 11, p. 400–403, 1958.

- [Dayeh 13] S.A. Dayeh, W. Tang, F. Boioli, K.L. Kavanagh, H. Zheng, J. Wang, N.H. Mack, G. Swadener, J.Y. Huang, L. Miglio, K.-N. Tu & S.T. Picraux. *Direct measurement of coherency limits for strain relaxation in heteroepitaxial core/shell nanowires*. Nano Letters, vol. 13, no. 5, p. 1869–76, 2013.
- [Denoual 04] C. Denoual. *Dynamic dislocation modeling by combining Peierls Nabarro and Galerkin methods*. Physical Review B, vol. 70, no. 2, p. 024106, 2004.
- [Dollins 70] C.C. Dollins. *Nucleation on dislocations*. Acta Metallurgica, vol. 18, p. 1209–1215, 1970.
- [Drits 84] M. E. Drits, J. Dutkiewicz, L. S. Toropova & J. Salawa. *The effect of solution treatment on the ageing processes of Al-Sc alloys*. Crystal Research and Technology, vol. 19, no. 10, p. 1325–1330, 1984.
- [Dunand 91a] D.C. Dunand & A. Mortensen. *Dislocation emission at fibers - II. experiments and microstructure of thermal punching*. Materials Science, vol. 39, no. 7, p. 1417–1429, 1991.
- [Dunand 91b] D.C. Dunand & A. Mortensen. *On plastic relaxation of thermal stresses in reinforced metals*. Acta Metallurgica, vol. 39, no. 2, p. 127–139, 1991.
- [Dunand 91c] D.C. Dunand & A. Mortensen. *On the relaxation of a mismatching spheroid prismatic loop punching*. Scripta Metallurgica et Materialia, vol. 25, no. 4, p. 761, 1991.
- [Earmme 81] Y.Y. Earmme, W.C. Johnson & J.K. Lee. *Plastic relaxation of the transformation strain energy of a misfitting spherical precipitate : linear and power-law strain hardening*. Metallurgical Transactions A, vol. 12, p. 1521–1530, 1981.
- [Edelin 73a] G. Edelin & J.P. Poirier. *Etude de la montée des dislocations au moyen d'expériences de fluage par diffusion dans le magnésium - I. Mécanisme de déformation*. Philosophical Magazine, vol. 28, no. 6, p. 1203–1210, 1973.
- [Edelin 73b] G. Edelin & J.P. Poirier. *Etude de la montée des dislocations au moyen d'expériences de fluage par diffusion dans le magnésium - II. Mesure de la vitesse de montée*. Philosophical Magazine, vol. 28, no. 6, p. 1211–1223, 1973.
- [Eikum 64] A. Eikum & G. Thomas. *Precipitation and dislocation nucleation in quench-aged Al-Mg alloys*. Acta Metallurgica, vol. 12, p. 537, 1964.
- [Emrick 69] R.M. Emrick & P.B. McArdle. *Effet of Pressure on Quenched-In Electrical Resistance in Gold and Aluminum*. Physical Review, vol. 188, no. 3, p. 1156–1162, 1969.
- [Epishin 07] A. Epishin, T. Link & G. Nolze. *SEM investigation of interfacial dislocations in nickel-base superalloys*. Journal of Microscopy, vol. 228, no. 2, p. 110–7, 2007.
- [Eshelby 57] J.D. Eshelby. *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems*. Proceedings of the Royal Society of London, vol. 241, no. 1226, p. 376–396, 1957.
- [Frenkel 39] Y. Frenkel & T. Kontorova. *On the theory of plastic deformation and twinning*. J. Phys. USSR, vol. 1, p. 137–149, 1939.
- [Friedel 64] J. Friedel. Dislocations. Pergamon edition, 1964.
- [Fu 90] C.L. Fu. *Electronic, elastic, and fracture properties of trialuminide alloys : Al₃Sc and Al₃Ti*. Journal of Materials Research, vol. 5, no. 5, p. 971–979, 1990.

- [Gao 11] Y. Gao, Z. Zhuang, Z.L. Liu, X.C. You, X.C. Zhao & Z.H. Zhang. *Investigations of pipe-diffusion-based dislocation climb by discrete dislocation dynamics*. International Journal of Plasticity, vol. 27, no. 7, p. 1055–1071, 2011.
- [Gaubert 09] Anaïs Gaubert. *Modélisation des effets de l'évolution microstructurale sur le comportement mécanique du superalliage monocristallin AM1*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2009.
- [Gaubert 10] A. Gaubert, Y. Le Bouar & A. Finel. *Coupling phase field and viscoplasticity to study rafting in Ni-based superalloys*. Philosophical Magazine, vol. 90, no. 1-4, p. 375–404, 2010.
- [Geers 13] M.G.D. Geers, M. Cottura, B. Appolaire, E. Busso, S. Forest & A. Villani. *A view of the coupling between glide and climb in diffusion-enhanced crystal plasticity*. En préparation, 2013.
- [George 90] E.P. George, J.A. Horton, W.D. Porter & J.H. Schneibel. *Brittle Cleavage of L12 Trialuminides*. Journal of Materials Research, vol. 5, no. 8, p. 1639–1648, 1990.
- [Gibbs 67] G.B. Gibbs & J.A. Turnbull. *Vacancy-Loop Annealing in hexagonal and cubic lattices*. Metal Science Journal, vol. 1, p. 25–27, 1967.
- [Gorman 69] J.A. Gorman, D.S. Wood & T. Vreeland. *Mobility of Dislocations in Aluminum*. Journal of Applied Physics, vol. 40, no. 2, p. 833, 1969.
- [Groma 97] I. Groma. *Link between the microscopic and mesoscopic length-scale description of the collective behavior of dislocations*. Physical Review B, vol. 56, no. 10, p. 5807–5813, 1997.
- [Grydlik 12] M. Grydlik, F. Boioli, H. Groiss, R. Gatti, M. Brehm, F. Montalenti, B. Devincre, F. Schäffler & L. Miglio. *Misfit dislocation gettering by substrate pit-patterning in SiGe films on Si (001)*. Applied Physics Letters, vol. 101, p. 013119, 2012.
- [Haataja 04] M. Haataja. *Influence of mobile dislocations on phase separation in binary alloys*. Physical Review B, vol. 69, no. 081201, p. 1–4, 2004.
- [Haataja 05] M. Haataja, J. Mahon, N. Provatas & F. Léonard. *Scaling of domain size during spinodal decomposition : Dislocation discreteness and mobility effects*. Applied Physics Letters, vol. 87, no. 251901, 2005.
- [Ham 59] F.S. Ham. *Stress-Assisted Precipitation on Dislocations*. Journal of Applied Physics, vol. 30, no. 6, p. 915, 1959.
- [Hikata 70] A. Hikata, R.A. Johnson & C. Elbaum. *Interaction of Dislocations with Electrons and with Phonons*. Physical Review B, vol. 2, no. 12, p. 4856–4863, 1970.
- [Hirth 68] J.P. Hirth & J. Lothe. *Theory of dislocations*. Krieger Publishing Compagny, 1968.
- [Hu 01] S.Y. Hu & L.Q. Chen. *Solute segregation and coherent nucleation and growth near a dislocation—a phase-field model integrating defect and phase microstructures*. Acta Materialia, vol. 49, p. 463–472, 2001.
- [Hull 84] D. Hull & D.J. Bacon. *Introduction to dislocations*. 1984.
- [Huntington 55] H.B. Huntington. *Modification of the Peierls-Nabarro model for edge dislocation core*. Proceedings of the Physical Society B, vol. 68, no. 12, p. 1043–1048, 1955.

- [Hyland 91] R.W. Hyland & R.C. Stiffler. *Determination of the elastic constants of polycrystalline Al_3Sc* . Scripta Metallurgica et Materialia, vol. 25, no. 2, p. 473–477, 1991.
- [Hyland 92] R.W. Hyland. *Homogeneous nucleation kinetics of Al_3Sc in a dilute Al-Sc alloy*. Metallurgical Transactions A, vol. 23, p. 1947–1955, 1992.
- [Hyland 98] R.W. Hyland, M. Asta, S.M. Foiles & C.L. Rohrer. *$Al(f.c.c.) : Al_3Sc(L1-2)$ interphase boundary energy calculations*. Acta Materialia, vol. 46, no. 10, p. 3667–3678, 1998.
- [Iwamura 04] S. Iwamura & Y. Miura. *Loss in coherency and coarsening behavior of Al_3Sc precipitates*. Acta Materialia, vol. 52, no. 3, p. 591–600, 2004.
- [Jesser 69] W.A. Jesser. *On the theory of loss of coherency by spherical precipitates*. Philosophical Magazine, vol. 19, no. 161, p. 993–999, 1969.
- [Jin 01] Y.M. Jin & A.G. Khachaturyan. *Phase field microelasticity theory of dislocation dynamics in a polycrystal : model and three-dimensional simulations*. Philosophical Magazine Letters, vol. 81, no. 9, p. 607–616, 2001.
- [Jo 93] H.H. Jo & S.I. Fujikawa. *Kinetics of precipitation in Al_3Sc alloys and low temperature solid solubility of scandium in aluminium studied by electrical resistivity measurements*. Materials Science and Engineering : A, vol. 171, p. 151–161, 1993.
- [Johnson 83] W. C. Johnson & J. K. Lee. *A dislocation model for the plastic relaxation of the transformation strain energy of a misfitting spherical particle*. Acta Metallurgica, vol. 31, no. 7, p. 1033–1045, 1983.
- [Jones 03] M.J. Jones & F.J. Humphreys. *Interaction of recrystallization and precipitation : the effect of Al_3Sc on the recrystallization behaviour of deformed aluminium*. Acta Materialia, vol. 51, no. 8, p. 2149–2159, 2003.
- [Joós 94] B. Joós, Q. Ren & M.S. Duesbery. *Peierls-Nabarro model of dislocations in silicon with generalized stacking-fault restoring forces*. Physical Review B, vol. 50, no. 9, p. 5890, 1994.
- [Joós 97] B. Joós & M. Duesbery. *The Peierls Stress of Dislocations : An Analytic Formula*. Physical Review Letters, vol. 78, no. 2, p. 266–269, 1997.
- [Kabir 10] M. Kabir, T. Lau, D. Rodney, S. Yip & K. Van Vliet. *Predicting Dislocation Climb and Creep from Explicit Atomistic Details*. Physical Review Letters, vol. 105, no. 9, p. 1–4, 2010.
- [Keralavarma 12] S. Keralavarma, T. Cagin, A. Arsenlis & A. Benzerga. *Power-Law Creep from Discrete Dislocation Dynamics*. Physical Review Letters, vol. 109, no. 26, p. 265504, 2012.
- [Khachaturyan 83] A. G. Khachaturyan. *Theory of Structural Transformations in Solids*. Wiley, New York, 1983.
- [Kibey 07] S. Kibey, J.B. Liu, D.D. Johnson & H. Sehitoglu. *Predicting twinning stress in fcc metals : Linking twin-energy pathways to twin nucleation*. Acta Materialia, vol. 55, no. 20, p. 6843–6851, 2007.
- [Koslowski 02] M. Koslowski & M. Ortiz. *A phase-field theory of dislocation dynamics, strain hardening and hysteresis in ductile single crystals*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 50, p. 2597–2635, 2002.

- [Koslowski 04] M. Koslowski, R. LeSar & R. Thomson. *Dislocation Structures and the Deformation of Materials*. Physical Review Letters, vol. 93, no. 26, p. 2–5, 2004.
- [Koslowski 07] M. Koslowski. *Scaling laws in plastic deformation*. Philosophical Magazine, vol. 87, no. 8-9, p. 1175–1184, 2007.
- [Kubin 13] L.P. Kubin. *Dislocations, Mesoscale Simulations and Plastic Flow*. Oxford University Press, 2013.
- [Kuksin 08] A.Y. Kuksin, V.V. Stegailov & A.V. Yanilkin. *Molecular-dynamics simulation of edge-dislocation dynamics in aluminum*. Doklady Physics, vol. 53, no. 6, p. 287–291, 2008.
- [Landau 67] L. Landau & E. Lifchitz. *Théorie de l'élasticité*. MIR, 1967.
- [Landau 93] A.I. Landau, A.S. Kovalev & A.D. Kondratyuk. *Model of Interacting Atomic Chains and Its Application to the Description of the Crowdion in an Anisotropic Crystal*. physica status solidi (b), vol. 179, no. 2, p. 373–381, 1993.
- [Landau 94] A.I. Landau. *Application of a model of interacting atomic chains for the description of edge dislocations*. Physica Status Solidi (b), vol. 103, p. 407, 1994.
- [Le Hazif 68] R. Le Hazif, J. Antolin & J.M. Dupouy. *Creep of Beryllium Single Crystals Compressed along the C Axis*. Transactions of the Japan Institute of Metals, vol. 9, p. 247, 1968.
- [Lee 80] J.K. Lee, Y.Y. Earmme, H.I. Aaronson & K.C. Russel. *Plastic relaxation of the transformation strain energy of a misfitting spherical precipitate : ideal plastic behavior*. Metallurgical Transactions A, vol. 11, p. 1837–1847, 1980.
- [Lee 96] J.K. Lee. *A study on coherency strain and precipitate morphology via a discrete atom method*. Metallurgical and Materials Transactions A, vol. 27, p. 1449–1459, 1996.
- [Lee 98] J.K. Lee. *Dynamic interaction between a coherent precipitate and an edge dislocation*. Metallurgical and Materials Transactions A, vol. 29, p. 2039–2048, 1998.
- [Léonard 98] F. Léonard & R.C. Desai. *Spinodal decomposition and dislocation lines in thin films and bulk materials*. Physical Review B, vol. 58, no. 13, p. 8277–8288, 1998.
- [Li 09] Y.-S. Li, S.-X. Li & T.-Y. Zhang. *Effect of dislocations on spinodal decomposition in Fe–Cr alloys*. Journal of Nuclear Materials, vol. 395, no. 1-3, p. 120–130, 2009.
- [Li 12] Y. Li, S. Hu, C.H. Henager, H. Deng, F. Gao, Xin Sun & Moe a. Khaleel. *Computer simulations of interstitial loop growth kinetics in irradiated bcc Fe*. Journal of Nuclear Materials, vol. 427, no. 1-3, p. 259–267, 2012.
- [Lifshitz 61] I.M. Lifshitz & V.V. Slyozov. *The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions*. Journal of Physics and Chemistry of Solids, vol. 19, no. 1, p. 35–50, 1961.
- [Lim 09] A.T. Lim, D.J. Srolovitz & M. Haataja. *Low-angle grain boundary migration in the presence of extrinsic dislocations*. Acta Materialia, vol. 57, no. 17, p. 5013–5022, 2009.
- [Lim 12] A.T. Lim, M. Haataja, W. Cai & D.J. Srolovitz. *Stress-driven migration of simple low-angle mixed grain boundaries*. Acta Materialia, vol. 60, no. 3, p. 1395–1407, 2012.
- [Link 11] T. Link, A. Epishin, M. Paulisch & T. May. *Topography of semicoherent γ/γ' -interfaces in superalloys : Investigation of the formation mechanism*. Materials Science and Engineering : A, vol. 528, no. 19-20, p. 6225–6234, 2011.

- [Lothe 60] J. Lothe. *Theory of dislocation climb in metals*. Journal of Applied Physics, vol. 31, no. 6, p. 1077–1087, 1960.
- [Lothe 67] J. Lothe & J.P. Hirth. *Dislocation climb forces*. Journal of Applied Physics, vol. 38, no. 2, p. 845–848, 1967.
- [Lu 00] G. Lu, N. Kioussis, V.V. Bulatov & E. Kaxiras. *The peierls-nabarro model revisited*. Philosophical Magazine Letters, vol. 80, no. 10, p. 675–682, 2000.
- [Lu 01] G. Lu, N. Kioussis, V.V. Bulatov & E. Kaxiras. *Dislocation core properties of aluminum : a first-principles study*. Materials Science and Engineering : A, vol. 309-310, p. 142–147, 2001.
- [Lu 05] G. Lu. *The Peierls–Nabarro model of dislocations : a venerable theory and its current development*. In Handbook of Materials Modeling. Volume I : Methods and Models, volume I, p. 1–19. 2005.
- [Luo 07] W. Luo, C. Shen & Y. Wang. *Nucleation of ordered particles at dislocations and formation of split patterns*. Acta Materialia, vol. 55, no. 8, p. 2579–2586, 2007.
- [Madelung 90] O. Madelung, editeur. Landolt-Bornstein : Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology, volume 25. Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [Makenas 80] B.J. Makenas & H.K. Birnbaum. *Phase changes in the niobium-hydrogen system I : accommodation effects during hydride precipitation*. Acta Metallurgica, vol. 28, no. 7, p. 979–988, 1980.
- [Mao 11] Z. Mao, W. Chen, D.N. Seidman & C. Wolverton. *First-principles study of the nucleation and stability of ordered precipitates in ternary Al–Sc–Li alloys*. Acta Materialia, vol. 59, no. 8, p. 3012–3023, 2011.
- [Margvelashvili 74] I.G. Margvelashvili & Z.K. Saralidze. *Influence of an elastic field of a dislocation on steady-state diffusion fluxes of point defects*. Sov. Phys.-Solid State (Engl. Transl.), vol. 15, no. 9, p. 1774–1776, 1974.
- [Marquis 01] E.A. Marquis & D.N. Seidman. *Nanoscale structural evolution of Al₃Sc precipitates in Al(Sc) alloys*. Acta Materialia, vol. 49, no. 11, p. 1909–1919, 2001.
- [Marquis 03] E.A. Marquis, D.N. Seidman & D.C. Dunand. *Precipitation strengthening at ambient and elevated temperatures of heat-treatable Al(Sc) alloys*. Acta Materialia, vol. 51, no. 1, p. 285–287, 2003.
- [Min 05] B.K. Min, H.W. Kim & S.B. Kang. *Effect of Al₃Sc precipitate on the microstructural evolution during accumulative roll bonding in Al-0.2 wt.% Sc alloy*. Journal of Materials Processing Technology, vol. 163, p. 355–361, 2005.
- [Minami 04] A. Minami & A. Onuki. *Dislocation formation in two-phase alloys*. Physical Review B, vol. 70, no. 18, p. 1–10, 2004.
- [Minami 05] A. Minami & A. Onuki. *Dislocation formation and plastic flow in binary alloys in three dimensions*. Physical Review B, vol. 72, no. 10, p. 1–4, 2005.
- [Minami 07] A. Minami & A. Onuki. *Nonlinear elasticity theory of dislocation formation and composition change in binary alloys in three dimensions*. Acta Materialia, vol. 55, no. 7, p. 2375–2384, 2007.

- [Monnet 11] G. Monnet, S. Naamane & B. Devincere. *Orowan strengthening at low temperatures in bcc materials studied by dislocation dynamics simulations*. Acta Materialia, vol. 59, no. 2, p. 451–461, 2011.
- [Mordehai 08] D. Mordehai, E. Clouet, M. Fivel & M. Verdier. *Introducing dislocation climb by bulk diffusion in discrete dislocation dynamics*. Philosophical Magazine, vol. 88, no. 6, p. 899–925, 2008.
- [Mordehai 11] D. Mordehai & G. Martin. *Enhanced annealing of the dislocation network under irradiation*. Physical Review B, vol. 84, p. 014115, 2011.
- [Moulinec 98] H. Moulinec & P. Suquet. *A numerical method for computing the overall response of nonlinear composites with complex microstructure*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 157, no. 1-2, p. 69–94, 1998.
- [Mura 87] T. Mura. *Micromechanics of Defects in Solids*. Martinus Nijhoff Publishers, 1987.
- [Nabarro 47] F.R.N. Nabarro. *Dislocations in a simple cubic lattice*. Proceedings of the Physical Society, vol. 59, p. 256, 1947.
- [Nabarro 51] F.R.N. Nabarro. CXXII. *The synthesis of elastic dislocation fields*. Philosophical Magazine Series 7, vol. 42, no. 334, p. 1224–1231, 1951.
- [Nabarro 97] F.R.N. Nabarro. *Theoretical and experimental estimates of the Peierls stress*. Philosophical Magazine A, vol. 75, no. 3, p. 703–711, 1997.
- [Nazarov 12] R. Nazarov, T. Hickel & J. Neugebauer. *Vacancy formation energies in fcc metals : Influence of exchange-correlation functionals and correction schemes*. Physical Review B, vol. 85, no. 14, p. 144118, 2012.
- [Novotny 01] G.M. Novotny & A.J. Ardell. *Precipitation of Al₃Sc in binary Al–Sc alloys*. Materials Science and Engineering : A, vol. 318, p. 144–154, 2001.
- [Ohsawa 97] K. Ohsawa, E. Kuramoto & T. Suzuki. *Computer simulation of Peierls stress by using lattice statics Green's function*. Materials Science and Engineering : A, vol. 234-236, p. 302–305, 1997.
- [Onuki 03] Akira Onuki. *Plastic flow in two-dimensional solids*. Physical Review E, vol. 68, no. 6, p. 1–17, 2003.
- [Peierls 40] R. Peierls. *The size of a dislocation*. Proceedings of the Physical Society, vol. 52, no. 1, p. 34–37, 1940.
- [Powell 75] J. Powell & J. Burke. *A determination of the elastic energy of dislocation loops from coarsening kinetics*. Philosophical Magazine, vol. 31, no. 4, p. 943–951, 1975.
- [Quek 11] S.S. Quek, Y. Xiang & D.J. Srolovitz. *Loss of interface coherency around a misfitting spherical inclusion*. Acta Materialia, vol. 59, no. 14, p. 5398–5410, 2011.
- [Raabe 98] D. Raabe. *On the consideration of climb in discrete dislocation dynamics*. Philosophical Magazine A, vol. 77, no. 3, p. 37–41, 1998.
- [Rauch 65] G.C. Rauch, R.M. Rose & J. Wulff. *Observations on microstructure and superconductivity in the Nb–H system*. Journal of the Less Common Metals, vol. 8, p. 99–113, 1965.

- [Robson 03] J.D. Robson, M.J. Jones & P.B. Prangnell. *Extension of the N-model to predict competing homogeneous and heterogeneous precipitation in Al-Sc alloys*. Acta Materialia, vol. 51, no. 5, p. 1453–1468, 2003.
- [Rodney 01] D. Rodney & A. Finel. *Phase Field Methods and Dislocations*. In MRS Proceedings, volume 652, 2001.
- [Rodney 03] D. Rodney, Y. Le Bouar & A. Finel. *Phase field methods and dislocations*. Acta Materialia, vol. 51, p. 17–30, 2003.
- [Royset 05a] J. Royset & N. Ryum. *Kinetics and mechanisms of precipitation in an Al–0.2wt.% Sc alloy*. Materials Science and Engineering : A, vol. 396, no. 1-2, p. 409–422, 2005.
- [Royset 05b] J. Royset & N. Ryum. *Scandium in aluminium alloys*. International Materials Reviews, vol. 50, no. 1, p. 19–44, 2005.
- [Royset 05c] J. Royset & N. Ryum. *Some comments on the misfit and coherency loss of AlSc particles in Al-Sc alloys*. Scripta Materialia, vol. 52, no. 12, p. 1275–1279, 2005.
- [Saenger 00] E.H. Saenger, N. Gold & S.A. Shapiro. *Modeling the propagation of elastic waves using a modified finite-difference grid*. Wave Motion, vol. 31, no. 1, p. 77–92, 2000.
- [Salman 09] Oğuz Umut Salman. *Modeling of spatio-temporal dynamics and patterning mechanisms of martensites by phase-field and Lagrangian methods*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2009.
- [Salman 11] O.U. Salman & L. Truskinovsky. *Minimal Integer Automaton behind Crystal Plasticity*. Physical Review Letters, vol. 106, no. 17, p. 1–4, 2011.
- [Sankaran 74] R. Sankaran & C. Laird. *The role of intruder dislocations in modifying the misfit dislocation structures and growth kinetics of precipitate plates*. Metallurgical and Materials Transactions B, vol. 5, no. August, p. 1795–1803, 1974.
- [Seidman 65] D.N. Seidman & R.W. Balluffi. *Sources of Thermally Generated Vacancies in Single-Crystal and Polycrystalline Gold*. Physical Review, vol. 139, no. 6A, p. 1824–1840, 1965.
- [Seidman 66a] D.N. Seidman & R.W. Balluffi. *On the annealing of dislocation loops by climb*. Philosophical Magazine, vol. 13, no. 123, p. 649–654, 1966.
- [Seidman 66b] D.N. Seidman & R.W. Balluffi. *On the efficiency of dislocation climb in gold*. Physica Status Solidi (b), vol. 17, p. 531, 1966.
- [Seidman 02] D.N. Seidman, E.A. Marquis & D.C. Dunand. *Precipitation strengthening at ambient and elevated temperatures of heat-treatable Al(Sc) alloys*. Acta Materialia, vol. 50, no. 16, p. 4021–4035, 2002.
- [Sekerka 75] R F. Sekerka, C.L. Jeanfils & R.W. Heckel. *The Moving Boundary Problem*. In H. I. Aaronson, editeur, Lectures on the Theory of Phase Transformations, chapitre 4, p. 117–169. Aime edition, 1975.
- [Shchyglo 12] O. Shchyglo, O.U. Salman & A. Finel. *Martensitic phase transformations in Ni–Ti-based shape memory alloys : The Landau theory*. Acta Materialia, vol. 60, no. 19, p. 6784–6792, 2012.
- [Shen 03] C. Shen & Y. Wang. *Phase field model of dislocation networks*. Acta Materialia, vol. 51, no. 9, p. 2595–2610, 2003.

- [Shen 04] C. Shen & Y. Wang. *Incorporation of γ -surface to phase field model of dislocations : simulating dislocation dissociation in fcc crystals*. Acta Materialia, vol. 52, no. 3, p. 683–691, 2004.
- [Shi 12] R. Shi, N. Ma & Y. Wang. *Predicting equilibrium shape of precipitates as function of coherency state*. Acta Materialia, vol. 60, no. 10, p. 4172–4184, 2012.
- [Shin 01] C.S. Shin, M.C. Fivel & K.H. Oh. *Nucleation and propagation of dislocations near a precipitate using 3D discrete dislocation dynamics simulations*. Le Journal de Physique IV, vol. 11, no. Pr5, p. 27–35, 2001.
- [Siebörger 01] D. Siebörger, H. Knake & U. Glatzel. *Temperature dependence of the elastic moduli of the nickel-base superalloy CMSX-4 and its isolated phases*. Materials Science and Engineering : A, vol. 298, p. 26–33, 2001.
- [Silcox 60] J. Silcox & M.J. Whelan. *Direct observations of the annealing of prismatic dislocation loops and of climb of dislocations in quenched aluminium*. Philosophical Magazine, vol. 5, no. 49, p. 1–23, 1960.
- [Sonderegger 09] B. Sonderegger & E. Kozeschnik. *Generalized Nearest-Neighbor Broken-Bond Analysis of Randomly Oriented Coherent Interfaces in Multicomponent Fcc and Bcc Structures*. Metallurgical and Materials Transactions : A, vol. 40, no. 3, p. 499–510, 2009.
- [Tan 76] T.Y. Tan & W.K. Tice. *Oxygen precipitation and the generation of dislocations in silicon*. Philosophical Magazine, vol. 34, p. 37–41, 1976.
- [Tanaka 72] K. Tanaka, K. Narita & T. Mori. *Work hardening of materials with strong inclusions after prismatic punching*. Acta Metallurgica, vol. 20, no. 3, p. 297–304, 1972.
- [Tartour 68] J.-P. Tartour & J. Washburn. *Climb kinetics of dislocation loops in aluminium*. Philosophical Magazine, vol. 18, no. 156, p. 1257–1267, 1968.
- [Thuinet 12a] L. Thuinet & R. Besson. *Ab initio study of competitive hydride formation in zirconium alloys*. Intermetallics, vol. 20, no. 1, p. 24–32, 2012.
- [Thuinet 12b] L. Thuinet, A. De Backer & A. Legris. *Phase-field modeling of precipitate evolution dynamics in elastically inhomogeneous low-symmetry systems : Application to hydride precipitation in Ze*. Acta Materialia, vol. 60, p. 5311–5321, 2012.
- [Tsivoulas 06] D. Tsivoulas & J.D. Robson. *Coherency Loss of Al_3Sc Precipitates during Ageing of Dilute Al-Sc Alloys*. Materials Science Forum, vol. 519–521, p. 473–478, 2006.
- [Tsuru 07] T. Tsuru & Y. Shibutani. *Initial yield process around a spherical inclusion in single-crystalline aluminium*. Journal of Physics D : Applied Physics, vol. 40, no. 7, p. 2183–2188, 2007.
- [Vattré 09a] A. Vattré, B. Devincre & A. Roos. *Dislocation dynamics simulations of precipitation hardening in Ni-based superalloys with high γ' volume fraction*. Intermetallics, vol. 17, no. 12, p. 988–994, 2009.
- [Vattré 09b] Aurélien Vattré. *Durcissement des superalliages monocristallins : des mécanismes physiques à la modélisation continue*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2009.
- [Vattré 10] A. Vattré, B. Devincre & A. Roos. *Orientation dependence of plastic deformation in nickel-based single crystal superalloys : Discrete–continuous model simulations*. Acta Materialia, vol. 58, no. 6, p. 1938–1951, 2010.

- [Vitek 68] V. Vitek. *Intrinsic stacking faults in body-centred cubic crystals*. Philosophical Magazine, vol. 18, p. 773–786, 1968.
- [Völkl 98] R. Völkl, U. Glatzel & M. Feller-Kniepmeier. *Measurement of the lattice misfit in the single crystal nickel based superalloys CMSX-4, SRR99 and SC16 by convergent beam electron diffraction*. Acta Materialia, vol. 46, no. 12, p. 4395–4404, 1998.
- [Vorontsov 10] V.A. Vorontsov, C. Shen, Y. Wang, D. Dye & C.M.F. Rae. *Shearing of precipitates by $a<112>$ dislocation ribbons in Ni-base superalloys : A phase field approach*. Acta Materialia, vol. 58, no. 12, p. 4110–4119, 2010.
- [Vorontsov 12] V.A. Vorontsov, L. Kovarik, M.J. Mills & C.M.F. Rae. *High-resolution electron microscopy of dislocation ribbons in a CMSX-4 superalloy single crystal*. Acta Materialia, vol. 60, no. 12, p. 4866–4878, 2012.
- [Wang 96a] J.N. Wang. *A new modification of the formulation of Peierls stress*. Acta Materialia, vol. 44, no. 4, p. 1541–1546, 1996.
- [Wang 96b] J.N. Wang. *Prediction of Peierls stresses for different crystals*. Materials Science and Engineering : A, vol. 206, no. 2, p. 259–269, 1996.
- [Wang 00] Y. Wang, D.J. Srolovitz, J.M. Rickman & R. Lesar. *Dislocation motion in the presence of diffusing solutes : a computer simulation study*. Acta Materialia, vol. 48, p. 2163–2175, 2000.
- [Wang 01] Y.U. Wang, Y.M. Jin & A.M. Cuitino. *Nanoscale phase field microelasticity theory of dislocations : model and 3d simulations*. Acta Materialia, vol. 49, p. 1847–1857, 2001.
- [Wang 03] Y.U. Wang, Y.M. Jin & A.G. Khachaturyan. *Phase field microelasticity modeling of dislocation dynamics near free surface and in heteroepitaxial thin films*. Acta Materialia, vol. 51, no. 14, p. 4209–4223, 2003.
- [Wang 10] Y. Wang & J. Li. *Phase field modeling of defects and deformation*. Acta Materialia, vol. 58, no. 4, p. 1212–1235, 2010.
- [Watanabe 04] C. Watanabe, T. Kondo & R. Monzen. *Coarsening of Al_3Sc precipitates in an Al-0.28 wt pct Sc alloy*. Metallurgical and Materials Transactions A, vol. 35, p. 3003–3008, 2004.
- [Weatherly 68a] G.C. Weatherly. *Loss of coherency of growing particles by the prismatic punching of dislocation loops*. Philosophical Magazine, vol. 17, no. 148, p. 791–799, 1968.
- [Weatherly 68b] G.C. Weatherly & R.B. Nicholson. *An electron microscope investigation of the interfacial structure of semi-coherent precipitates*. Philosophical Magazine, vol. 17, no. 148, p. 801–831, 1968.
- [Woodward 01] C. Woodward, M. Asta, G. Kresse & J. Hafner. *Density of constitutional and thermal point defects in $L_{12} Al_3Sc$* . Physical Review B, vol. 63, no. 9, p. 094103, 2001.
- [Woodward 08] C. Woodward, D. Trinkle, L. Hector & D. Olmsted. *Prediction of Dislocation Cores in Aluminum from Density Functional Theory*. Physical Review Letters, vol. 100, no. 4, p. 045507, 2008.
- [Xiang 03] Y. Xiang, L.-T. Cheng, D.J. Srolovitz & E. Weinan. *A level set method for dislocation dynamics*. Acta Materialia, vol. 51, no. 18, p. 5499–5518, 2003.

- [Xiang 08] Y. Xiang, H. Wei, P. Ming & E. Weinan. *A generalized Peierls–Nabarro model for curved dislocations and core structures of dislocation loops in Al and Cu*. *Acta Materialia*, vol. 56, no. 7, p. 1447–1460, 2008.
- [Xin 97] X.J. Xin, G.S. Daehn & R.H. Wagoner. *Equilibrium configuration of coaxial prismatic dislocation loops and related size-dependent plasticity*. *Acta Materialia*, vol. 45, no. 5, p. 1821–1836, 1997.
- [Zeng 01] Y. Q. Zeng & Q. H. Liu. *A staggered-grid finite-difference method with perfectly matched layers for poroelastic wave equations*. *The Journal of the Acoustical Society of America*, vol. 109, no. 6, p. 2571, 2001.
- [Zhao 08a] Z. Zhao, A. Legris, L. Thuinet, Y. Kihn, A. Ambard & L. Legras. *Characterization of Zirconium Hydrides and Phase Field Approach to a Mesoscopic-Scale Modeling of Their Precipitation*. *Journal of ASTM International*, vol. 5, no. 3, p. 1–20, 2008.
- [Zhao 08b] Z. Zhao, J.-P. Morniroli, A. Legris, A. Ambard, Y. Khin, L. Legras & M. Blat-Yrieix. *Identification and characterization of a new zirconium hydride*. *Journal of Microscopy*, vol. 232, no. 3, p. 410–21, 2008.
- [Zhou 07] N. Zhou, C. Shen, M.J. Mills & Y. Wang. *Phase field modeling of channel dislocation activity and γ' rafting in single crystal Ni–Al*. *Acta Materialia*, vol. 55, no. 16, p. 5369–5381, 2007.
- [Zhou 10] N. Zhou, C. Shen, M. Mills & Y. Wang. *Large-scale three-dimensional phase field simulation of γ' rafting and creep deformation*. *Philosophical Magazine*, vol. 90, no. 1-4, p. 405–436, 2010.
- [Zhou 11] N. Zhou, C. Shen, M.J. Mills, J. Li & Y. Wang. *Modeling displacive–diffusional coupled dislocation shearing of γ' precipitates in Ni-base superalloys*. *Acta Materialia*, vol. 59, no. 9, p. 3484–3497, 2011.