HAL open science

Modélisation numérique de la plasticité des matériaux amorphes

Sylvain Patinet

▶ To cite this version:

Sylvain Patinet. Modélisation numérique de la plasticité des matériaux amorphes. Mécanique des solides [physics.class-ph]. Université Paris Sciences & Lettres, 2022. tel-03779182v1

HAL Id: tel-03779182

https://theses.hal.science/tel-03779182v1

Submitted on 16 Sep 2022 (v1), last revised 20 Mar 2023 (v2)

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 PSL (Paris Sciences & Lettres)

ÉCOLE DOCTORALE ESPCI Paris-PSL

Habilitation à Diriger des Recherches

Présentée par

Sylvain PATINET

Modélisation numérique de la plasticité des matériaux amorphes

préparée à l'ESPCI au laboratoire de Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes

soutenue le 16 juin 2022

Jury :

Rapporteurs :	Mathieu BAUCHY	-	Univ. of California
	Emanuela DEL GADO	-	Georgetown Univ.
	Giuseppe FOFFI	-	Univ. Paris-Saclay
Examinatrice :	Lucilla DE ARCANGELIS	-	Univ. of Campania "L. Vanvitelli"
Président :	Michel CLOÎTRE	-	ESPCI

À mes parents, la méthode et le panache.

Remerciements

Je remercie tout d'abord les chercheurs qui m'ont fait l'honneur de faire partie de mon jury d'habilitation à diriger des recherches : Lucilla de Arcangelis, Mathieu Bauchy, Michel Cloître, Emanuela Del Gado et Giuseppe Foffi (Penso in particolare ai nostri amici italiani). Leur expertise et la pluralité de leurs points de vue ont permis, je crois, une discussion des plus enrichissantes sur le sujet ; une belle rencontre scientifique.

J'aimerais saisir l'opportunité offerte par la rédaction de ce manuscrit pour remercier mes principaux collaborateurs : Michael Falk, Anaël Lemaître, Stéphane Roux et Damien Vandembroucq. Je considère comme une chance immense d'avoir pu collaborer avec des scientifiques de cette qualité auprès desquels j'ai énormément appris. Il va de soi que la plupart des résultats présentés dans ce manuscrit n'auraient pas été possibles sans leur concours. Je remercie également les étudiants en thèse et en postdoctorat que j'ai pu encadrer au cours de ces dernières années. J'ai en particulier une pensée pour Matthias Lerbinger qui nous a malheureusement quitté.

Une fois n'est pas coutume, je souhaiterais remercier mon employeur, le CNRS, qui, malgré tout, et pour paraphraser Jean-Pierre Vernant, se comporte encore davantage en jardinier qu'en berger. Dotée d'un collectif avant tout mû par la passion, il s'agit d'une « entreprise » singulière à tous points de vue. Je tiens à ce propos à remercier chaleureusement mes collègues de la section 9. Mon mandat au sein du comité national restera pour moi une aventure institutionnelle, scientifique et humaine.

Je m'étais juré avant d'avoir un poste d'être tous les jours reconnaissant. Bien entendu, j'échoue lamentablement dans cette tâche devant les petits tracas du quotidien. Je suis d'autant moins excusable que je bénéficie d'un environnement de travail exceptionnel au laboratoire PMMH. À cet égard, je tiens à remercier tout d'abord les personnes qui font fonctionner le laboratoire au quotidien : Frédérique Auger, Claudette Barez, Philippe Petitjeans et Damien Vandembroucq. Je remercie en particulier Antonin Eddi, le deuxième Dupont/d, avec lequel j'ai eu la chance de tant partager. Surtout, je voudrais remercier l'ensemble des personnels du PMMH, chercheurs comme étudiants, qui participent à faire de ce laboratoire un lieu à l'ambiance unique où la science pousse verte.

J'achève ces remerciements en exprimant ma plus profonde reconnaissance à ma famille, Adèle, Jeanne et Le San, qui me supportent, moi et ma recherche envahissante. Si mon travail participe un jour de quelque manière que ce soit à l'histoire de la connaissance, il leur devra leur patience et leur soutien.

Les Lilas, 10 septembre 2022.

Préface

Dussé-je y passer ma vie, il me sera sûrement impossible d'en faire le tour. Telle est à peu de choses près la pensée qui m'a traversé l'esprit lorsque j'ai fait la rencontre avec la déformation des matériaux amorphes. Qu'on en juge par la complexité du sujet : ces solides sont par définition désordonnés à l'échelle des particules ce qui rend l'exercice d'identification de paramètres d'ordres structuraux des plus problématiques. Ces systèmes sont de plus hors d'équilibre thermodynamique et leurs propriétés dépendent par conséquent de leur histoire [Cavagna 2009].
En outre, cet état de la matière se prête mal aux approches perturbatives d'habitude si fructueuses. Il n'existe pas pour ces systèmes de « petit paramètre », comme c'est le cas de l'interaction entre particules dans l'état gazeux ou de celui de la position des atomes pour les cristaux [Trachenko 2016]. Un solide amorphe hérite de la complexité du liquide dont il est issu et partage avec lui une similarité structurale qui rend difficile la distinction entre ces deux états de la matière condensée.
D'un point de vue mécanique, il n'est pas possible de définir des défauts topologiques comme les dislocations, à la base de la description physique de la déformation dans les cristaux [Hirth 1982]. Pour corser la situation, les solides amorphes sont le plus souvent mécaniquement fragiles, et présentent de la localisation, ce qui complexifie l'étude expérimentale de leur déformation.

Face à cette complexité, les simulations numériques ont été un outil de choix dans ma démarche. Elles présentent plusieurs avantages. Le premier d'entre eux réside dans le fait de disposer de toute l'information et de pouvoir simplifier à outrance les systèmes étudiés. Le deuxième est d'offrir le moyen de manipuler l'objet d'étude à sa guise et de réaliser de véritables expériences numériques qu'il aurait été impossibles de mener autrement. Ce que le calcul numérique perd ici en élégance analytique, il le gagne en intégration de la complexité. Il s'agit d'un appendice moderne, pour certain d'un véritable télescope pour l'esprit [Buchanan 2008].
Mon positionnement académique à l'interface de la physique, de la mécanique et de la science des matériaux constitue également un avantage. Comme il sera présenté dans ce manuscrit, la plasticité des solides amorphes se manifeste en effet par des réarrangements locaux en interaction élastique à longue portée [Maloney 2006a]. Leur réponse mécanique est donc pilotée par une compétition entre désordre et élasticité. Il s'agit d'un terrain de jeu idéal à la fois pour le mécanicien voulant décrire un écoulement continu effectif et pour le physicien souhaitant se pencher sur ses fluctuations.

Ce positionnement est le produit de mon parcours débuté en thèse par l'étude du glissement des dislocations depuis l'échelle atomique. Je reste profondément influencé par la métallurgie physique. De ce point de vue, la comparaison avec la mécanique des solides amorphes est à la fois cruelle et excitante. Elle est cruelle car les derniers travaux de modélisation portant sur les dislocations atteignent parfois des descriptions quantitatives [Kraych 2019], quand la définition des mécanismes

dans les amorphes est encore en construction [Rodney 2011]. Elle est aussi excitante car la mécanique des solides amorphes se décline dans d'innombrables applications. En outre, malgré des progrès de modélisation foisonnants ces dernières années, il reste encore de nombreux phénomènes à comprendre, même qualitativement. Cette tension est l'objet du chapitre 1 dans lequel je présente le contexte, l'état de l'art et les défis relatifs à l'étude de la modélisation de la mécanique des solides amorphes.

Depuis ma prise de fonction au laboratoire de Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes, un élément essentiel de mon travail a été de pouvoir quantifier la susceptibilité plastique locale des solides amorphes. Je me suis en particulier intéressé au problème de la mesure. Pour cela, j'ai développé une méthode permettant de sonder localement les limites d'élasticité des systèmes afin d'en fournir un champ complet. Cette méthode est décrite dans le chapitre 2 dans lequel je montre que les limites d'élasticité ainsi calculées ont un pouvoir prédictif de l'activité plastique remarquable. Cette démarche a été ensuite systématisée dans le cadre d'une large collaboration internationale. Au-delà de la corrélation obtenue entre réarrangements plastiques et seuils de contrainte locaux, cette méthode répond à plusieurs problèmes en fournissant une mesure non-perturbative, directionnelle et d'ordre $\mathcal{N}$ (nous dirions « embarrassingly parallel » en anglais). Il s'agit donc d'un outil idéal pour documenter avec une grande richesse ce qu'il se passe « à l'intérieur » d'un solide amorphe.

Le chapitre 3 illustre trois avancées permises par la méthode des limites d'élasticité locales. Dans un premier temps, je discute du problème de la localisation en étudiant comment l'adoucissement se produit dans une bande de cisaillement. Dans un deuxième temps, je présente une étude consacrée à la polarisation des seuils de contrainte lors de la déformation plastique à l'origine de l'effet Bauschinger dans les solides amorphes. Le chapitre se conclut par l'étude de la dynamique des liquides surfondus en température dans laquelle les réarrangements de cisaillement offrent une image intuitive des relaxations dans l'espace réel. Ces résultats jettent un pont entre mécanique athermique et dynamique des systèmes vitreux.

Le chapitre 4 se penche sur une description de la mécanique des solides amorphes à une échelle supérieure à l'aide de modèles élasto-plastiques. J'y présente un premier passage quantitatif entre échelle atomique et échelle mésoscopique. Cette modèlisation multi-échelle est réalisée dans un premier temps dans l'état stationnaire d'écoulement puis dans l'état transitoire à partir d'une large gamme de protocoles de préparation.

En conclusion, je reporte enfin une liste de résultats obtenus et discute des perspectives et des projets de recherche que je souhaite poursuivre dans les années à venir. Ce manuscrit est complété par des annexes techniques, des projets parallèles ainsi que mon curriculum vitae.

Table des matières

1 Une courte revue de la plasticité des solides amorphes **1**

1.1 Contexte 1

1.2 État de l'art 3

1.3 Défis et questions ouvertes 6

1.4 Conclusion du chapitre 9

2 Limite d'élasticité locale : Une nouvelle observable numérique **11**

2.1 Connexion entre activité plastique et propriétés locales 12

2.1.1 Réponse mécanique athermique d'un verre modèle 12

2.1.2 Méthode des limites d'élasticité locales 14

2.1.3 Corrélation entre résistances plastiques résiduelles et emplacements des réarrangements plastiques 16

2.2 Analyse comparative et systématisation 19

2.3 Propriétés des limites d'élasticité locales : préparation, orientation et échelle de longueur 22

3 Mise en oeuvre des limites d'élasticité locales : localisation, polarisation et relaxations en température **27**

3.1 Rajeunissement mécanique et formation des bandes de cisaillements . 28

3.2 Origine de l'effet Bauschinger dans les solides amorphes 33

3.3 Connexions entre relaxations dans les liquides surfondus et propriétés mécaniques des états inhérents 37

4 Approche multi-échelle : des simulations atomistiques aux modèles mésoscopiques **43**

4.1 Transition quantitative entre modèles atomistique et élasto-plastique dans l'état stationnaire d'écoulement 44

4.1.1 Construction du modèle élasto-plastique 46

4.1.2 Calibration du modèle élasto-plastique 48

4.1.3 Échelle de longueur et ingrédients clés 51

4.2 Extension au régime transitoire et effet du protocole de trempe . . . 54

4.2.1 Développement du modèle élasto-plastique au régime transitoire 54

4.2.2 Réponse mécanique dans le régime transitoire 56

4.3 Conclusion du chapitre 58

Conclusions et perpectives **61**

Annexes **68**

A Systèmes et méthodes **71**
A.1 Système 71
A.1.1 Potentiel interatomique 71
A.1.2 Échelles de températures 72
A.2 Champs mécaniques 73
A.2.1 Contraintes 73
A.2.2 Déformations 73

B Projets parallèles **77**
B.1 Mécanique d'un ensemble de chaînes granulaires entrelacées 77
B.2 Réseau d'ondes de Faraday vu comme un métamatériau élastique . . 79
B.3 Nucléation plastique dans des cristaux : modèle mésoscopique vs approche atomistique 81

C Curriculum vitae **83**

D Liste des publications **89**

Abréviations et notations **93**

Bibliographie **95**

Chapitre 1

Une courte revue de la plasticité des solides amorphes

Ce chapitre introductif a pour but de présenter les phénomènes physiques relatifs à la déformation plastique des matériaux amorphes, essentiellement au travers des résultats scientifiques précédant nos travaux. Dans un premier temps, nous introduisons les enjeux et les applications liés aux propriétés mécaniques de cette large classe de matériaux. Dans un deuxième temps, les mécanismes élémentaires de la déformation sont décrits en présentant les éléments clefs de compréhension à la base des interprétations théoriques de la déformation. Cette courte revue est l'occasion d'introduire les différentes méthodes de modélisations numériques principalement implémentées pour étudier la plasticité des matériaux amorphes. Cette synthèse bibliographique se conclue sur les défis et les questions encore ouvertes, nous permettant de contextualiser et de justifier les approches mises en oeuvre dans la suite de ce mémoire.

Sommaire

1.1 Contexte 1
1.2 État de l'art 3
1.3 Défis et questions ouvertes 6
1.4 Conclusion du chapitre 9

1.1 Contexte

Contrairement aux cristaux, les solides amorphes se caractérisent à l'échelle de leurs particules par une absence d'ordre à longue distance. Lorsque l'on pense aux matériaux amorphes au niveau moléculaire, le premier exemple qui vient naturellement à l'esprit est celui des verres de silicate. Ces matériaux sont utilisés dans de nombreux domaines d'application avancés tels que les fibres optiques, les fenêtres, les lentilles, les pare-brises automobiles, les écrans, les conteneurs, le verre antimicrobien et les techniques de vitrification pour convertir les déchets nucléaires dangereux en matériaux inertes.

Leur impact sur notre civilisation industrielle est tel que 2022 a été déclarée année internationale du verre par les Nations Unies. Pour certains, nous sommes

Figure 1.1 – Exemples de solides amorphes [Nicolas 2018]. De gauche à droite : club de golf en verre métallique, dentifrice, mayonnaise, mousse de café et graines de soja.

entrés dans l'ère du verre [Morse 2016]. Du fait qu'ils soient les minéraux les plus abondants de la croûte terrestre, une meilleure compréhension des propriétés mécaniques de ces matériaux ouvrirait non seulement la voie à la conception rationnelle de verres moins fragiles [Zhang 2022], mais ferait également progresser nos connaissances des processus géologiques.

Les progrès techniques des dernières décennies en matière de synthèse ont permis l'émergence d'autres types de verres moléculaires composés d'atomes métalliques, les verres métalliques [Schuh 2007]. Ces nouveaux matériaux possèdent des propriétés remarquables. Ils sont plus solides que l'acier, ont une plus grande résistance à l'usure et à la corrosion, sont plus tenaces que la céramique et ont pourtant une plus grande limite d'élasticité [Telford 2004]. Néanmoins, ils présentent également une certaine fragilité due à la localisation de la déformation sous forme de bandes de cisaillement, ce qui limite leur déploiement industriel à grande échelle.

Au-delà du désordre structurel, comment classer les verres vis-à-vis des matériaux amorphes ? Une définition potentielle est que les verres présentent une transition vitreuse (en les chauffant, ils se transforment de manière continue en liquide) alors que les solides amorphes ne le font pas (ils ont tendance à cristalliser lorsqu'on augmente la température). Dans la suite de ce manuscrit, nous nous permettrons souvent un abus de langage « à la physicienne » et parlerons indistinctement de verre (comme le verre de silice) ou de solide amorphe (comme le silicium amorphe).

Les solides amorphes ne se réduisent pas en verres moléculaires durs, comme illustré sur la Fig. 1.2. À des échelles de longueur plus importantes, on trouve une autre classe de matériaux désordonnés, aujourd'hui appelée « matière molle ». Leur structure est également désordonnée, avec des particules constituées de colloïdes, de gouttes ou de bulles [Bonn 2017]. Les fluides à seuil, qui se comportent comme des solides en dessous d'une contrainte spécifique et s'écoulent comme un fluide au-dessus, sont des archétypes de ces systèmes. Ces matériaux mous sont omniprésents dans les industries alimentaires, cosmétiques et chimiques, où leurs propriétés rhéologiques jouent un rôle essentiel. Enfin, à la fin du spectre des longueurs, on trouve des matériaux granulaires dont les particules présentent égale-

ment des structures désordonnées. La statistique des contacts domine leur réponse mécanique, habituellement décrite en régime athermique en raison des échelles impliquées [Andreotti 2013]. La compréhension de leurs propriétés mécaniques est également un enjeu important en géologie ou dans de nombreuses applications industrielles (construction, transport, stockage).

Nous voyons que les solides amorphes couvrent des échelles de longueur et d'énergie considérables. A titre de comparaison, le module de Young d'une mousse est d'environ 100 Pa quand celui d'un verre métallique est d'environ 100 GPa, soit une différence de neuf ordres de grandeur. Il est donc aisé de comprendre que la manière d'aborder leur description mécanique est historiquement radicalement différente. La déformation des verres moléculaires durs est généralement décrite par la plasticité, c'est-à-dire par la déformation irréversible, et par la mécanique de la rupture. D'autre part, l'étude de la mécanique de la matière molle est le plus souvent réalisée par le prisme de la rhéologie [Seth 2011, Vlassopoulos 2014], où l'on cherche à lier vitesse de déformation et contrainte appliquée.

Malgré ces différences profondes, les solides amorphes présentent des propriétés mécaniques universelles qui appellent une compréhension globale [Nicolas 2018]. Même s'ils sont fragiles, les verres moléculaires peuvent présenter des courbes d'écoulement à petite échelle ou à haute température similaires aux matériaux mous. De plus, la plupart des matériaux amorphes se caractérisent par un comportement adoucissant conduisant à une localisation de la déformation plastique sous forme de bande de cisaillement [Schall 2010, Greer 2013]. Cette localisation se trouve, par exemple, dans les fluides à seuil et les verres métalliques ou, à plus grande échelle, dans des événements catastrophiques tels que des glissements de terrain. Les fluides à seuil et les colloïdes vieillis peuvent présenter des pics de contrainte suivis d'un ramollissement. Tout aussi frappante est la généralité des courbes d'écoulement de type Herschel et Bulkley trouvées dans les fluides à seuil [Liu 2018b]. Ces caractéristiques communes proviennent de la similitude de leurs processus élémentaires de déformation qui sont une conséquence directe de leur structure désordonnée.

1.2 État de l'art

Les premières études quantitatives portant sur la physique de la déformation des solides amorphes remontent à la fin des années 1970. Dans une expérience astucieuse mettant en œuvre un radeau de bulles désordonnées, un analogue de verre métallique, Argon observe que la réponse aux contraintes mécaniques se manifeste par des réarrangements locaux qu'il nomme Transformations de Cisaillement (STs) [Argon 1979a]. Argon et Spaepen proposent alors une théorie de la réponse mécanique à partir de l'activation sous contrainte de ces STs [Argon 1979b, Spaepen 1977]. Le taux de déformation du système est modélisé par le produit de la densité des événements d'écoulement et de leur fréquence

d'activation biaisée par la contrainte appliquée. Leur description utilise en outre le volume libre comme variable interne pour rendre compte de l'évolution de la densité des STs. Ces études pionnières fournissent une compréhension phénoménologique remarquable de la réponse viscoplastique des solides amorphes et ont depuis été largement utilisées pour interpréter les expériences [Schuh 2007].

De nombreux résultats expérimentaux et numériques ont depuis confirmé cette vision de la déformation plastique basée sur la dynamique des réarrangements locaux ou événements d'écoulement. Aux petites échelles, la réponse mécanique sous cisaillement est caractérisée par des chargements élastiques entrecoupés de chutes de contraintes. Ces sauts de contraintes correspondent à des réarrangements locaux de particules sous forme de STs. En général, ces STs sont complexes et présentent une large distribution de tailles et d'amplitudes. Depuis, une question fondamentale réside dans la compréhension de ces réarrangements topologiques et de leur lien avec la structure initiale, avant chargement.

La topologie locale des particules réarrangées n'est pas la seule zone de la structure affectée par ces STs. Ces réarrangements redistribuent en effet leurs contraintes à longue portée dans la matrice environnante pour rétablir l'équilibre mécanique. Cette redistribution est caractérisée par un champ de déplacement quadripolaire décroissant suivant $\sim 1/r^{d-1}$ avec r la distance au réarrangement et d la dimension, comme observé expérimentalement dans les colloïdes [Jensen 2014, Desmond 2015] et les matériaux granulaires [Le Bouil 2014]. Cette forme fonctionnelle est bien comprise dans le cadre de la mécanique des milieux continus. Elle correspond à la réponse élastique à une déformation libre de cisaillement d'une inclusion ellipsoïdale [Eshelby 1957]. En plus du chargement macroscopique, les zones du matériau vont donc recevoir des contributions élastiques provenant de toutes les STs sous la forme d'un bruit mécanique. Cette interaction à longue portée est la source d'une grande richesse phénoménologique où l'élasticité entre en concurrence avec le désordre. Les événements plastiques ne sont plus indépendants et peuvent former des avalanches, conduisant à des phénomènes critiques : distribution en loi de puissance des chutes de contraintes, stabilité marginale et effets de taille [Lin 2014a].

Il convient d'ajouter que les solides amorphes sont élastiquement hétérogènes avec des propriétés qui varient au cours de la déformation [Albaret 2016]. Cette variation des propriétés mécaniques est communément appelée « endommagement » en mécanique. Elle correspond souvent à une dégradation de la rigidité du matériau et, à plus grande échelle, à l'apparition de fissures microscopiques. Les hétérogénéités élastiques, et leur évolution, peuvent être vues comme un second effet non local. Il produit des fluctuations spatiales de la contrainte locale autour du chargement macroscopique moyen, même en l'absence d'activité plastique dans les autres parties du solide.

Au cours des dernières décennies, trois stratégies de modélisation ont

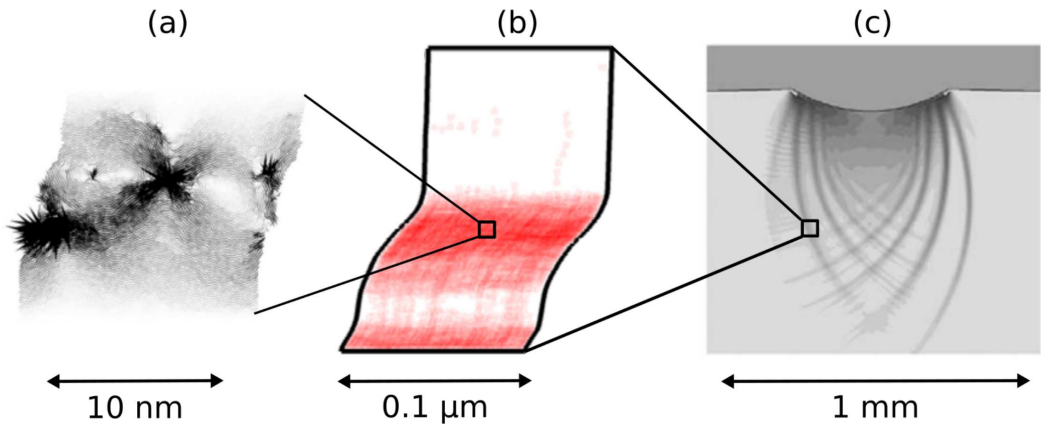

Figure 1.2 – Méthodes de modélisation multi-échelles des solides amorphes [Rodney 2011]. a) Simulation atomistique montrant une transformation de cisaillement (ST) avec un champ de déplacement à longue portée quadrupolaire typique. b) Simulation mésoscopique discrète où les éléments de la grille correspondent à des zones de transformation de cisaillement (STZ) activables interagissant élastiquement. c) Méthode par éléments finis continue dans une géométrie d'indentation comportant de la localisation de la déformation au travers de bandes de cisaillement.

été développées afin de comprendre la réponse mécanique des matériaux amorphes [Rodney 2011]. Comme le montre la Fig. 4.2, elles peuvent être classées selon différentes échelles de longueur : microscopique, mésoscopique et continue. Les premières simulations atomistiques ont réellement débutées il y a 20 ans avec les travaux pionniers de Falk et Langer [Falk 1998]. Ces auteurs ont ouvert un nouveau champ disciplinaire et introduit le concept de Shear Transformation Zone (STZ), c'est-à-dire des zones réarrangeables sous cisaillement et encodées dans la structure avant chargement.

Les échelles d'espace et de temps que peut atteindre la dynamique moléculaire (MD) classique sont néanmoins limitées. Ainsi, les simulations atomistiques ont été complétées par des approches mésoscopiques discrètes, permettant de reproduire la réponse mécanique des matériaux amorphes tout en réduisant considérablement le nombre de degrés de liberté à traiter [Nicolas 2018]. Ces approches élasto-plastiques considèrent une population discrète de STZ activables dans un milieu élastique. Elles peuvent être vues comme un analogue mécanique d'un modèle d'Ising où la déformation plastique locale et le propagateur élastique correspondent respectivement au spin et à l'interaction entre les sites.

La dernière famille de modèles considère une description continue de la réponse mécanique. Suivant une approche de physique statistique, des modèles de champ moyen considèrent l'évolution de la population des STZs [Sollich 1997, Hébraud 1998]. Dans ces modèles, la notion d'espace disparaît, et le bruit mécanique généré par l'activité des STs est traité comme une température effective. Une approche radicalement différente suivie par la commu-

nauté théorique de mécanique a cherché à développer des modèles continus en considérant des systèmes homogènes à grande échelle, où la notion de STZ discrète disparaît. Le plus souvent résolues par la méthode des éléments finis (FEM), ces approches permettent de traiter des géométries et des chargements complexes. Elles considèrent un système d'équations aux dérivées partielles correspondant aux équations d'équilibre et de conservation et à une série de règles traitant de l'évolution du matériau lors de la déformation : une surface de charge, une loi d'écrouissage et une règle d'écoulement [Su 2006].

1.3 Défis et questions ouvertes

En dépit de toutes les avancées méthodologiques et théoriques décrites précédemment, la modélisation des propriétés mécaniques des solides amorphes se heurte encore à des challenges exceptionnels. Ils correspondent au manque de compréhension des mécanismes élémentaires en relation avec la structure et à la fragmentation des résultats et des approches en termes de systèmes, d'échelles et de communautés scientifiques. En plus de leur complexité relative au désordre, à leur état hors d'équilibre et aux difficultés expérimentales liées à leur instabilité, l'étude de ces systèmes doit en effet encore répondre à des questions scientifiques largement ouvertes. Ces questions peuvent être classées en plusieurs catégories résumées dans les paragraphes suivants.

Absence de liens formels entre structure et mécanismes élémentaires de plasticité et d'endommagement - Toutes les revues traitant de la déformation des solides amorphes concluent à l'absence de lien quantitatif entre structure locale et propriétés mécaniques [Rodney 2011]. Il s'agit du problème central. La situation actuelle est rendue d'autant plus inconfortable par l'abondance de données atomistiques qui permet en principe d'identifier les origines structurales des STs par des approches d'apprentissage automatique [Cubuk 2015]. À ce stade, même en connaissant la position exacte de chaque particule et leur interaction, les expérimentateurs seraient confrontés au même problème.
De nombreuses tentatives ont été mises en œuvre dans la littérature pour établir une corrélation entre propriétés et structures locales [Bauchy 2015]. Plusieurs propriétés ont été proposées, allant du volume libre, de l'ordre à courte portée, des modules élastiques [Tsamados 2009] jusqu'aux modes de vibration mous localisés [Ding 2014]. Ces propriétés locales sont néanmoins généralement scalaires, alors que l'on sait que la réponse mécanique locale dépend de la direction de chargement. Ils ont également montré un pouvoir prédictif relativement faible des réarrangements plastiques et sont dépendants du système [Richard 2020]. Surtout, même lorsque la corrélation est excellente, par exemple pour le machine learning [Cubuk 2017], l'interprétation est indirecte d'un point de vue physique, une corrélation n'étant ni un seuil de contrainte ni une barrière énergétique. En

outre, notons que la plupart des études se sont concentrées sur le cisaillement, mais peu ont pris en compte la cavitation [Guan 2013].

Systèmes atomistiques : écart avec les expériences, problèmes de technicité et de reproductibilité - La première difficulté technique réside dans les petites échelles de temps accessibles via la MD classique [Ninarello 2017]. Pour obtenir des solides amorphes par simulations directes, on peut s'attendre, au mieux, à une vitesse de trempe de six ordres de grandeur plus rapide que celle des expériences. Notons qu'en plus de cet écart considérable d'échelle de temps, il existe également un fossé énorme en terme d'échelle d'espace pouvant conduire à des effets de taille finie notables comme dans le cas de la formation des bandes de cisaillement.
Un deuxième problème provient de la grande sensibilité des propriétés mécaniques vis-à-vis des détails des interactions entre particules [Ferreiro-Córdova 2020]. Ceci est illustré par les importantes variations de propriétés avec le microalliage sur la résistance aux dommages [Zhang 2022], la propagation des fissures [Murali 2011], la cavitation [An 2011], les bandes de cisaillement [Greer 2013], la formabilité du verre [Schuh 2007] et les modules élastiques [Gu 2008]. Malgré des efforts importants, les études portent généralement sur des systèmes modèles et abordent le plus souvent ces questions à partir d'un système spécifique.
De plus, même si l'on sait ce que l'on recherche dans la structure, la caractérisation des amorphes nécessite des analyses structurales avancées [Richard 2020], le calcul de modes de vibration ou encore l'exploration du paysage énergétique [Tang 2021]. Ainsi, un scientifique souhaitant étudier les propriétés mécaniques des matériaux amorphes via des simulations atomistiques doit généralement commencer par réaliser des simulations longues et consommatrices d'énergie et rencontre des difficultés à reproduire quantitativement les résultats de la littérature.

Évolution des propriétés avec l'histoire thermomécanique - Si la prédiction des propriétés mécaniques d'un solide amorphe uniquement à partir de sa structure est encore une question ouverte, il est encore plus complexe de déterminer leur évolution avec la préparation, la déformation et l' endommagement [Tang 2021]. En général, l'image d'un paysage énergétique potentiel (PEL) désordonné fournit un outil pratique pour comprendre l'évolution des solides amorphes par les mécanismes de relaxation (mouvement descendant) ou rajeunissement (mouvement ascendant). Cependant, pour certains phénomènes, comme le cyclage thermique cryogénique [Ketkaew 2020], cette image ne tient pas, même qualitativement. La compréhension de cette évolution est rendue encore plus difficile en présence d'une compétition entre température, vitesse de déformation et pression [Pan 2018].

Nature de la transition d'écoulement - Des comportements critiques ont été observés dans l'état d'écoulement stationnaire [Maloney 2004a], sous cyclage mécanique [Bhaumik 2022] et dans le régime pseudo-élastique de verres

au repos [Shang 2020]. Motivées par ces observations, des études ont cherché à comprendre la transition d'écoulement (ou « yielding transition » en anglais) dans le contexte d'une transition de phase dynamique telle que la transition de dépiégeage [Tyukodi 2016]. Une question fondamentale à laquelle il reste encore à répondre est la nature de cette transition entre une phase solide et une phase d'écoulement. Des conclusions contrastées ont été rapportées [Barlow 2020]. La transition a été décrite comme une transition de premier ordre [Jaiswal 2016] ou un point critique aléatoire [Ozawa 2018], tandis que d'autres études basées sur des conditions de cisaillement oscillantes la définissent comme un attracteur [Leishangthem 2017] ou un seuil d'irréversibilité [Regev 2013]. Dans ce contexte, comme dans beaucoup d'autres relatifs aux systèmes amorphes, un point de blocage réside dans l'absence de paramètre d'ordre caractérisant les statistiques des STs et de leur évolution avec la déformation.

Formation des instabilités globales : bandes de cisaillement et fissures - La localisation de la déformation plastique sous forme de bandes de cisaillement résulte d'un comportement adoucissant, c'est-à-dire de la réduction des seuils de déformation plastique avec le chargement. Les bandes de cisaillement atomistiques sont différentes de celles observées expérimentalement car elles sont transitoires et ne persistent généralement pas. Dans ce contexte, on ne sait pas encore où vont se produire ces instabilités pour une structure donnée, ni quelle sera leur dynamique en fonction de la température, du taux de cisaillement et de la pression du milieu environnant [Greer 2013].
Qu'il s'agisse de bandes de cisaillement ou de rupture, la nature des instabilités globales dépendra du désordre initial. Dans la limite du désordre infinitésimal, c'est-à-dire pour un matériau présentant seulement quelques défauts isolés, la statistique de défaillance de la structure peut être comprise comme une transition de phase du premier ordre de type nucléation. À l'inverse, la concentration des contraintes n'opère plus dans la limite du désordre infini, et l'instabilité progresse par percolation non corrélée [Shekhawat 2013]. Dans ce contexte, la question d'un critère de nucléation pour appréhender quantitativement les effets de préparation (intrinsèques) de ceux de la taille du système (extrinsèques) reste ouverte [Richard 2021a].

Manque de transition entre les échelles dans les stratégies de modélisation - Si les modèles élasto-plastiques rendent compte avec succès d'une majorité de phénomènes [Fielding 2021], la plupart d'entre eux reposent sur des hypothèses très simplificatrices : description scalaire, homogénéité des temps élastiques et de relaxation, distribution de seuils fixés a priori, statistiques de propriétés qui ne changent pas avec la plasticité et l'endommagement, pas de dépendance à la pression [Rodney 2011, Nicolas 2018]. Toutes ces hypothèses contredisent les résultats obtenus ces dernières années à partir de simulations microscopiques [Tsamados 2009, Barbot 2018, Shang 2019].
Aux échelles supérieures, les modèles continus sont basés sur des équations consti-

tutives phénoménologiques et considèrent une description homogénéisée. L'homogénéisation repose sur le principe de la séparation des échelles et la présence d'un volume élémentaire représentatif (RVE) [Geers 2010]. Néanmoins, lorsque les hétérogénéités de la microstructure et la distribution de l'endommagement ne sont pas statistiquement homogènes, la description effective dépend de la position dans l'espace et devient influencée par les interactions simultanées entre l'endommagement et la microstructure. Compte tenu du caractère adoucissant de la plupart des solides amorphes, qui implique de la localisation, les approches classiques d'homogénéisation utilisées en mécanique sont à proscrire, et il est nécessaire d'employer des modèles à cinématiques enrichis avec des longueurs internes [Kaiser 2021]. Des questions brûlantes restent ouvertes dans ce contexte : Quelle est l'origine microscopique (fluctuations) de la rhéologie non locale lors du passage d'un modèle mésoscopique discret à des approches continues ? Comment dériver physiquement les longueurs internes ?
Alors que le processus de fracture est d'une importance immense, sa compréhension est encore très limitée [Xi 2005]. La modélisation de la rupture dans les solides amorphes couplée à la plasticité et à l'endommagement n'a quasiment jamais été abordée pour les systèmes hétérogènes amorphes [Rycroft 2012]. Les approches statistiques traitant de la nucléation de fissures d'un milieu hétérogène se sont jusqu'à présent concentrées sur des modèles simplifiés de type fusibles aléatoires [de Arcangelis 1985, Shekhawat 2013]. La raison en est la grande difficulté technique liée au traitement de l'évolution des hétérogénéités élastiques et de la nucléation des fissures associées à l'apparition des singularités élastiques.

1.4 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons présenté le contexte et introduit la problématique générale de la déformation plastique des matériaux amorphes. Compris au sens large comme un état solide dont la structure à l'échelle des particules est désordonnée, il apparaît que cette vaste classe de matériaux traverse de nombreuses échelles d'espace et d'énergie. En dépit de ces différences profondes, les mécanismes de leur déformation plastique présentent des similarités dont la compréhension peut déboucher sur des généralisations puissantes.

Le bilan des travaux présentés montre que l'interprétation de la déformation des solides amorphes est bien établie. Elle repose sur la description de la dynamique de réarrangements plastiques locaux et de leur interaction élastique sous la forme de STs. Cette vision se décline au travers de plusieurs modélisations aux différentes échelles permettant de reproduire la réponse mécanique dans une majorité de situations. Une description réellement physique et quantitative pose en revanche toujours problème. De nombreuses questions associées à la dépendance vis-à-vis des types d'interactions entre particules, à la localisation, à la nature de la transition d'écoulement ainsi qu'à la transition entre les échelles restent encore largement

ouvertes.

Nous concluons ce chapitre en soulignant que la question la plus pressante réside de notre point de vue dans l'absence de liens formels entre structure à l'échelle des particules et activité plastique, à l'instar du rôle joué par les dislocations dans la plasticité cristalline. Cette question déborde largement sur les autres problèmes au sens où sa résolution permettrait de fournir un paramètre d'ordre pertinent en vue d'une description physique de la déformation à partir de la structure et de son évolution sous chargement. C'est ce problème central qui a guidé nos travaux au cours des dernières années et dont les principaux résultats sont présentés dans les chapitres suivants.

Chapitre 2

Limite d'élasticité locale : Une nouvelle observable numérique

Au regard de la synthèse présentée dans le chapitre précédent, il est désormais admis que la réponse plastique des solides amorphes repose sur l'activation de réarrangements plastiques locaux. Toutefois, un lien formel entre structure locale et STs n'est pas encore établi malgré de nombreux travaux scientifiques. Cette situation inconfortable n'est pas anodine et témoigne de la complexité des phénomènes en jeu. Nous avons par conséquent cherché à orienter nos investigations numériques dans deux directions principales : 1) étudier la déformation dans des solides amorphes les plus simples possibles et 2) développer une mesure de la susceptibilité plastique locale.

Pour cela, nous mettons en oeuvre des simulations de statique moléculaire dans des verres binaires bidimensionnels modèles obtenus à partir de différents protocoles de trempe. Ces simulations nous permettent de calculer les emplacements successifs des STs. Nous adoptons une stratégie indirecte pour aborder la relation structure-propriété en développant une méthode d'échantillonnage des limites d'élasticités locales. S'il n'épuise pas la question, ce pas de côté méthodologique pragmatique nous donne accès à la susceptibilité plastique locale. Il fournit la statistique complète des seuils de glissement. Son pouvoir prédictif des emplacements des STs est mis en regard systématiquement avec des indicateurs structuraux plus classiques. Enfin, nous présentons les effets sur les limites d'élasticité du protocole de trempe, de la direction de chargement et de l'échelle de longueur échantillonnée.

Publications associées :
• S. Patinet, D. Vandembroucq and M. L. Falk, *Connecting Local Yield Stresses with Plastic Activity in Amorphous Solids*, Phys. Rev. Lett. **117**, 045501 (2016).
• D. Richard, M. Ozawa, S. Patinet, E. Stanifer, B. Shang, S. A. Ridout, B. Xu, G. Zhang, P. K. Morse, J.-L. Barrat, L. Berthier, M. Falk, P. Guan, A. Liu, K. Martens, S. Sastry, D. Vandembroucq, E. Lerner, M. Manning, *Predicting plasticity in disordered solids from structural indicators*, Phys. Rev. Mater. **4**, 113609 (2020).
• A. Barbot, M. Lerbinger, A. Hernandez-Garcia, R. García-García, M. L. Falk, D. Vandembroucq and S. Patinet, *Local yield stress statistics in model amorphous solids*, Phys. Rev. E **97**, 033001 (2018).

Sommaire

2.1 Connexion entre activité plastique et propriétés locales . . 12

2.1.1 Réponse mécanique athermique d'un verre modèle 12
2.1.2 Méthode des limites d'élasticité locales 14
2.1.3 Corrélation entre résistances plastiques résiduelles et emplacements des réarrangements plastiques 16
2.2 Analyse comparative et systématisation 19
2.3 Propriétés des limites d'élasticité locales : préparation, orientation et échelle de longueur 22

2.1 Connexion entre activité plastique et propriétés locales

2.1.1 Réponse mécanique athermique d'un verre modèle

Nous effectuons des simulations de MD avec le logiciel libre LAMMPS [Thompson 2022]. L'objet d'étude est un verre binaire bidimensionnel qui est connu pour sa bonne capacité de vitrification [Lançon 1984]. Il a déjà été utilisé pour étudier la plasticité des matériaux amorphes [Falk 1998, Shi 2005b, Shi 2005a, Shi 2007]. La grande majorité des résultats rapportés dans ce manuscrit correspondent à un ensemble de 100 échantillons contenant 10^4 d'atomes chacun obtenus par trempe de liquides à volume constant. Les détails techniques de ce système sont reportés dans l'annexe A.

Les deux types d'atomes interagissent via des potentiels interatomiques de type Lennard-Jones avec une distance de coupure R_{cut}. Dans ce qui suit, toutes les unités seront exprimées en termes de masse m et des deux paramètres décrivant les échelles d'énergie et de longueur de l'interaction interespèce, ε et σ, respectivement. En conséquence, le temps sera mesuré en unités $t_0 = \sigma\sqrt{m/\varepsilon}$. La température de transition vitreuse numérique effective T_g^{sim} de ce système est d'environ $T_g^{sim} = 0.31\,\varepsilon/k$, où k est la constante de Boltzmann. Nous définissons cette température comme la température en dessous de laquelle l'équilibrage du système par une méthode de MD classique devient prohibitive, avec un temps de relaxation $t_\alpha \gtrapprox 10^7$.

Afin de mettre en évidence les liens entre la microstructure, la stabilité des verres et leurs propriétés mécaniques, trois protocoles de trempe différents sont considérés. Les deux premiers types de verre sont obtenus après des trempes instantanées à partir d'états liquides à haute température (HTL) et de liquides surfondus équilibrés (ESL) à $T = 9,62\,T_g^{sim}$ et $T = 1.13\,T_g^{sim}$, respectivement. Le dernier protocole consiste en une trempe graduelle (GQ) durant laquelle la température est continuellement diminuée d'un état liquide, équilibré à $1.13\,T_g^{sim}$, à un état solide à basse température à $0.096\,T_g^{sim}$, sur une période de $10^6\,t_0$ à l'aide d'un thermostat [Hoover 1985]. Le système est ensuite trempé instantanément.

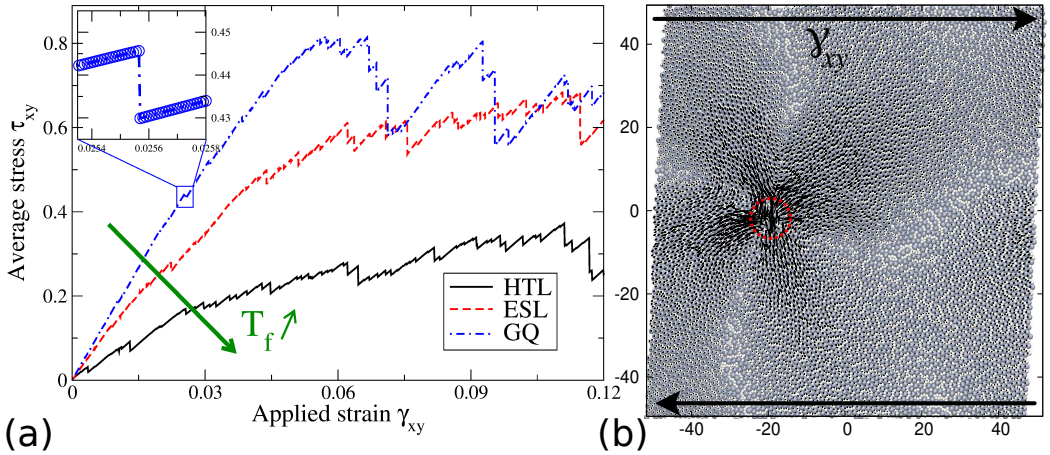

Figure 2.1 – (a) Courbes contrainte-déformation typiques pour les trois protocoles de trempe : trempe instantanée à partir d'un liquide à haute température (HTL, ligne continue), trempe instantanée à partir d'un liquide surfondu (ESL, ligne pointillée) et trempe progressive (GQ, ligne tirets-pointillés). L'encart montre un zoom d'une chute de contrainte correspondant à un événement plastique. (b) Événement plastique : les flèches correspondent au champ de déplacement calculé entre le début de l'instabilité et juste après l'événement. Le centre de la région rouge présentant la déformation de cisaillement maximale donne l'emplacement du réarrangement plastique.

Tous les protocoles de trempe sont suivis d'une relaxation statique à volume constant via une méthode de gradient conjugué pour équilibrer mécaniquement les systèmes à température nulle. Le même algorithme de relaxation est utilisé ci-dessous pour étudier la réponse au chargement mécanique.

Cette approche produit trois types de solides amorphes très contrastés. Plus la température à partir de laquelle le système tombe hors d'équilibre est élevée, moins le système est relaxé [Sastry 1998]. Cet effet se reflète dans les valeurs des énergies potentielles moyennes des états inhérents (ISs) générés ou dans les modules de cisaillement moyens μ, c'est-à-dire la pente à l'origine des courbes contrainte-déformation reportées sur la Fig. 2.1a. Le module μ est égal à 8.85, 14.73 et 19.03 pour les systèmes HTL, ESL et GQ, respectivement. Comme prévu, la raideur du système augmente avec son niveau de relaxation.

Partant d'une configuration trempée, les verres sont déformés en cisaillement simple par une méthode athermique quasi statique (AQS) [Malandro 1998, Maloney 2004b] en imposant des conditions aux limites de type Lees-Edwards. Nous appliquons une série d'incréments de déformation $\Delta\gamma_{xy}$ au matériau en déplaçant les positions des atomes $\vec{r}$ suivant un champ de déplacement affine tel que $r_x \to r_x + r_y \Delta\gamma_{xy}$ et $r_y \to r_y$. Après chaque incrément de déformation, le système est relaxé jusqu'à l'équilibre mécanique.

Les événements plastiques sont détectés lorsque la contrainte calculée τ_{xy} diminue, signalant une instabilité mécanique. La réponse observée est typique

des matériaux amorphes aux petites échelles et se caractérise par des branches élastiques réversibles entrecoupées d'événements plastiques comme illustré sur la Fig. 2.1a. Plus le système initial est relaxé, plus il est rigide et plus le verre est dur. En accord avec [Shi 2005a], nous observons que la localisation de la déformation plastique augmente avec le degré de relaxation de l'état initial. Notons que dans le cas du système GQ une localisation intense de la déformation est observée autour de $\gamma_{xy} \sim 0.06$, avec l'apparition de bandes de cisaillement. Cette tendance à la localisation sera exploitée dans le Chap. 3.

Les positions des réarrangements plastiques localisés sont alors définies comme la position de l'atome ayant subi la déformation de cisaillement locale maximale lors d'un événement plastique. Cette approche nous permet d'obtenir les positions successives des STs lors de la déformation à partir de l'état trempé comme illustré sur la Fig. 2.1b.

2.1.2 Méthode des limites d'élasticité locales

Nous développons une méthode qui nous permet d'échantillonner les contraintes d'écoulement locales des solides vitreux pour différentes directions de chargement. Des techniques similaires ont été employées pour échantillonner les modules élastiques locaux [Mizuno 2013] ou les limites d'élasticité le long d'une seule direction dans des verres modèles [Puosi 2015].

Le principe de la méthode numérique est illustré sur la Fig. 2.2a. Elle consiste à sonder localement la réponse mécanique au sein d'une région de taille R_{free} (nommée région I) en contraignant les atomes extérieurs à celle-ci (nommée région II) à se déformer de manière purement affine. Seuls les atomes de la région I sont relaxés et peuvent se déformer de manière non affine. Les réarrangements plastiques sont donc forcés de se produire dans cette région et la limite d'élasticité locale peut être identifiée.

Nous échantillonnons les limites d'élasticité locales sur une grille carrée régulière de taille $R_{sampling}$. Les atomes n'interagissant pas, car situés à une distance de plus de $R_{free} + 2R_{cut}$ du centre de la région sondée, sont supprimés lors des simulations de chargement local, accélérant ainsi le calcul. Sauf mention explicite, nous choisissons $R_{sampling} = L/39 \approx R_{cut}$ et $R_{free} = 5$.

Le critère de plasticité et la méthode AQS sont les mêmes que ceux décrits dans la section précédente pour le système global. À cette échelle, les solides amorphes sont fortement hétérogènes et la limite d'élasticité n'est pas la même pour toutes les orientations du cisaillement. Nous échantillonnons donc la réponse mécanique en utilisant des conditions de chargement en cisaillement dans différentes directions α. Dix-huit directions, uniformément réparties entre $\alpha = -90°$ et $\alpha = 90°$, sont étudiées. La direction $\alpha = 0°$ correspond au cisaillement simple globale.

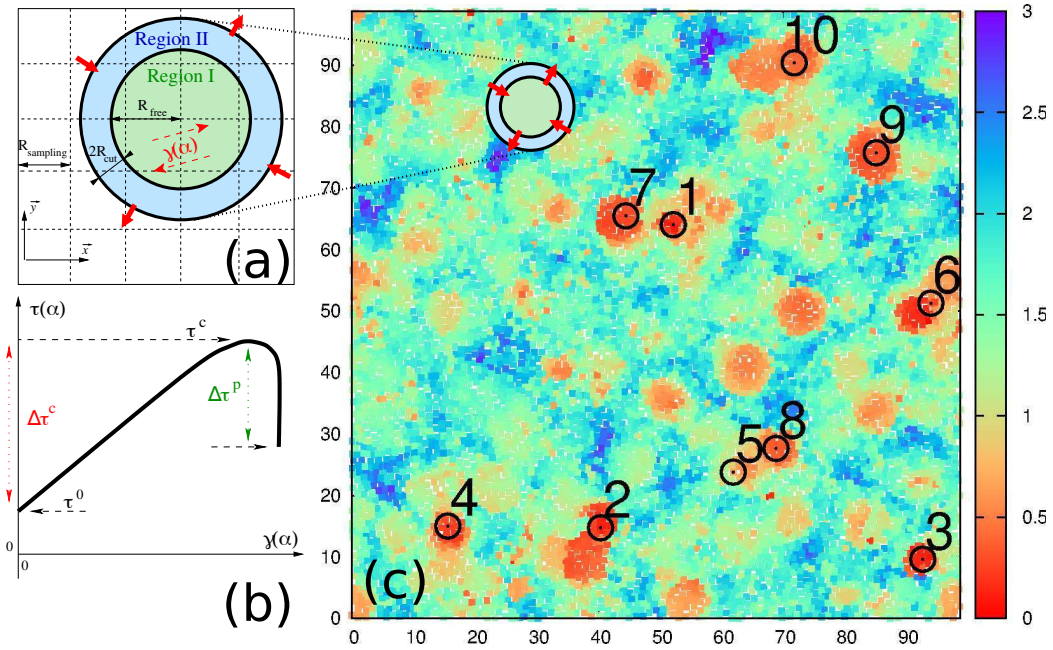

Figure 2.2 – (a) Schéma du calcul des limites d'élasticité locales sur une grille carrée régulière de taille de maille $R_{sampling}$. La région I (de rayon R_{free}) est complètement relaxée tandis que la région II (d'épaisseur $2\,R_{cut}$) se déforme suivant une déformation de cisaillement affine dans la direction α. (b) Réponse mécanique locale définissant la pré-contrainte τ^0, la limite d'élasticité τ^c, la résistance plastique résiduelle $\Delta\tau^c$ et la chute de contrainte $\Delta\tau^p$. (c) Carte de la résistance plastique résiduelle. Les dix premiers emplacements d'événements plastiques sont représentés par des cercles noirs numérotés par ordre d'apparition lors du chargement globale du système.

La contrainte de cisaillement $\tau(\alpha)$ dans la direction α est calculée sur les atomes appartenant à la région I en fonction de la déformation appliquée comme schématisé sur la Fig. 2.2b. La région I est cisaillée jusqu'à la première instabilité mécanique survenant à une contrainte critique $\tau^c(\alpha)$. Même au repos, les verres présentent des contraintes internes non nulles dues à la frustration inhérente aux solides amorphes. Une quantité plus pertinente pour lier les propriétés locales à l'activité plastique est donc la contrainte nécessaire pour déclencher un réarrangement plastique. L'état de contrainte de cisaillement local initial dans le verre trempé $\tau^0(\alpha)$ est donc soustrait de la contrainte critique pour obtenir l'augmentation de contrainte locale qui déclencherait une instabilité $\Delta\tau^c(\alpha) = \tau^c(\alpha) - \tau^0(\alpha)$. Cette quantité est définie comme la distance au seuil ou, de manière équivalente, à la résistance plastique résiduelle.

Nous considérons enfin les implications du champ de $\Delta\tau^c(\alpha)$ pour une direction particulière de chargement macroscopique α_l. Pour cela, nous faisons l'hypothèse simplificatrice d'une élasticité homogène au sein du système. Bien entendu, l'élasticité à cette échelle de longueur est hétérogène et conduit à des déplacements non affines sous chargement à distance comme le montre [Tsamados 2009]. Cette hypo-

thèse sert simplement à pouvoir estimer la contrainte ressentie par une zone locale due à un chargement à distance. Si la contrainte de cisaillement appliquée est homogène dans le verre, le réarrangement plastique qui aurait le plus de chance d'être activé pour un site donné correspond au seuil minimum (positif) $\Delta\tau^c(\alpha)$ projeté le long de la direction de chargement. Il peut être exprimé comme :

$$\Delta\tau_y = \min_{\alpha} \frac{\Delta\tau^c(\alpha)}{\cos(2[\alpha - \alpha_l])} \quad \text{with} \quad |\alpha - \alpha_l| < 45°. \tag{2.1}$$

En pratique, considérer $\Delta\tau_y$ au lieu de $\Delta\tau^c(\alpha_l)$ n'améliore que légèrement la corrélation observée pour les premiers réarrangements plastiques et n'affecte pas qualitativement les conclusions tirées dans ce manuscrit.

Nous obtenons ainsi des informations microscopiques sur la limite d'élasticité locale pour que la structure amorphe se réarrange. Les cartes de résistance plastique résiduelle locale $\Delta\tau_y(\alpha_l = 0°)$ calculées autour de tous les atomes sont illustrées sur la Fig. 2.2c. Nous distinguons une longueur de corrélation correspondant à la taille de la région sondée. En effet, un réarrangement plastique peut être activé plusieurs fois lors de l'échantillonnage de zones proches si son seuil est inférieur aux autres réarrangements possibles dans son voisinage. Cet effet conduit l'algorithme à attribuer des valeurs proches de $\Delta\tau_y$ sur une échelle $\sim R_{free}$. L'effet de R_{free} sera abordé ci-dessous, dans la Sec. 2.3. Il ressort de la Fig. 2.2c que les événements plastiques ont clairement tendance à se produire dans les régions caractérisées par de faibles valeurs de limites d'élasticité locales $\Delta\tau_y$.

2.1.3 Corrélation entre résistances plastiques résiduelles et emplacements des réarrangements plastiques

Avant de procéder à une caractérisation plus quantitative de la corrélation entre la limite élastique locale et l'évolution spatio-temporelle de l'activité plastique, notons que d'autres propriétés locales ont été proposées dans le même but avec lesquelles nous croisons nos résultats. On considère ici la densité ρ [Spaepen 1977], l'énergie potentielle (PE) [Shi 2007], l'ordre à courte portée (SRO) [Shi 2005a], le module de cisaillement C_{xyxy} [Tsamados 2009] et la Fraction de Participation (PF) dans les « zones molles » déterminées par une analyse des modes de vibrations quasi-localisés [Ding 2014]. Ces propriétés peuvent être divisées entre propriétés structurelles (ρ, PE, SRO) et réponses linéaires (C_{xyxy}, PF).

On s'attend à ce que les propriétés structurelles reflètent la stabilité locale du système et donc, potentiellement, la susceptibilité au chargement mécanique. L'idée principale des approches de type réponse linéaire est que les réarrangements associés aux chemins de déformation de basse énergie (calculés de manière perturbative) coïncideront avec les réarrangements plastiques irréversibles. Par souci de comparaison, toutes ces observables locales ont également été calculées sur une même grille régulière et moyennées sur une échelle de longueur $R_{GC} = 5$.

Afin de déterminer la fiabilité des propriétés locales pour prédire l'activité plastique, il est nécessaire de quantifier la relation entre les localisations successives des événements plastiques et les valeurs correspondantes des propriétés locales calculées à partir de la configuration initiale, avant le début du chargement. Pour ne pas introduire de paramètres arbitraires dans le calcul de cette corrélation, nous travaillons directement avec la distribution des différentes propriétés locales.

Les événements plastiques devraient se produire dans des zones caractérisées par des valeurs extrêmes des estimateurs locaux, par exemple un minimum des résistances plastiques résiduelles $\Delta\tau_y$. Nous calculons ainsi le rang dans la distribution des estimateurs locaux des sites i. Plus l'extremum est proche, plus la qualité prédictive de l'estimateur local est élevée. Plus précisément, la corrélation est définie en fonction de la valeur de la fonction de répartition (CDF) pour une propriété locale donnée à l'emplacement où la ST a lieu (donné par i_{max}). Nous définissons la corrélation comme :

$$C_\psi = 1 - 2\overline{CDF}(\psi_{i_{max}}), \tag{2.2}$$

où ψ est l'une des propriétés locales et $\overline{\text{CDF}}$ la moyenne de ses fonctions de répartition sur les différents échantillons. C_ψ varie entre -1 et 1, indiquant respectivement une anti-corrélation parfaite et une corrélation parfaite. C_ψ sera donc proche de 1 lorsque les réarrangements plastiques se concentrent dans des zones où $CDF(\psi)$ est petite. Cette définition a l'avantage d'être cohérente du fait de l'utilisation directe de la CDF. Les corrélations observées peuvent de plus être comparées aux fluctuations qui seraient obtenues à partir d'un champ aléatoire, c'est-à-dire au pire scénario en termes de prédiction.

Les corrélations calculées pour toutes les propriétés locales sont reportées dans la Fig. 2.3a en fonction de la déformation appliquée. Les indicateurs structurels (ρ, PE et SRO) montrent un faible pouvoir prédictif de l'activité plastique. Les seules propriétés montrant des corrélations significativement élevées sont les modules de cisaillement, les fractions de participation des modes mous à basse fréquence et les résistances plastique résiduelles locales. Le pouvoir prédictif des résistances plastique résiduelles locales surpasse tous les autres indicateurs. Plus important encore, nous observons que la corrélation $C_{\Delta\tau_y}$ persiste même après de nombreux réarrangements plastiques.

Comme prévu, les corrélations de C_{xyxy}, PF et $\Delta\tau_y$ diminuent avec le nombre d'événements plastiques à partir de l'état trempé, le matériau perdant la mémoire de son état initial lors de la déformation. De façon surprenante, on constate que les corrélations données par PE et SRO sont quasi constantes. Bien que faible, la corrélation est supérieure à un écart type de bruit blanc (~ 0.08). Pour la plupart des indicateurs, C_ψ converge vers cette dernière valeur. Cela suggère que si les grandeurs PE et SRO ne sont pas capables de résoudre des zones individuelles, ils peuvent éventuellement être corrélés avec des régions d'activité plastique élevée

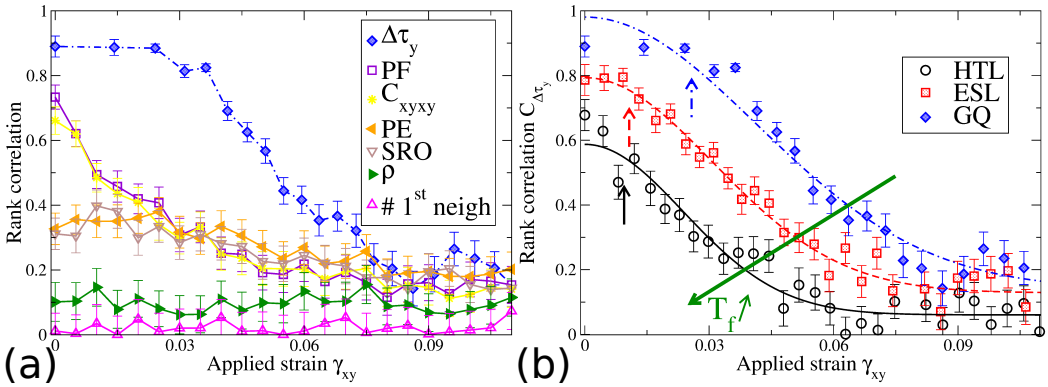

Figure 2.3 – Corrélation entre propriétés locales et emplacements des réarrangements plastiques en fonction de la déformation à partir de l'état trempé. Les barres d'erreur correspondent à un écart type. (a) Comparaison entre les indicateurs structuraux dans les verres GQ. (b) Même graphique restreint à la résistance plastique résiduelle $\Delta\tau_y$ pour les trois protocoles de préparation. Les flèches correspondent à la déformation moyenne du dixième événement plastique.

ou faible à plus grande échelle. Bien sûr, pour de plus grandes déformations, nous attendons $C_\psi \to 0$ pour toutes les propriétés locales. Il est important de noter que nous démontrons que le volume libre (ou toute mesure de densité locale), historiquement largement utilisé comme variable interne pour décrire la plasticité des verres métalliques, fonctionne bien moins que d'autres indicateurs. Le résultat le plus frappant de cette analyse reste néanmoins le niveau $C_{\Delta\tau_y}$ et sa lente décroissance.

Nous observons que le niveau de corrélation dépend de la préparation du système comme indiqué dans la Fig. 2.3b. Plus le système est stable, plus la corrélation observée est robuste. Les dix premiers réarrangements plastiques se produisent en moyenne dans les zones appartenant aux sites 23, 13 et 8.5% les plus mous pour les systèmes HTL, ESL et GQ, respectivement. Pour les verres trempés graduellement GQ, il est intéressant de noter que la corrélation décroît fortement pour une déformation correspondant à l'adoucissement dû à la localisation de la déformation.

Nous pouvons avancer que l'origine de la meilleure corrélation observée dans le système le plus relaxés provient directement de la distribution des seuils locaux. Les systèmes durs ont une population beaucoup plus petite de zones comportant des seuils faibles. Ils présentent donc un plus grand contraste de susceptibilité au cisaillement par rapport aux autres zones ou au bruit mécanique, ce qui facilite la prédiction du début de l'activité plastique.

2.2 Analyse comparative et systématisation

Malgré les résultats précédents, il était nécessaire de clarifier si la méthode des limites d'élasticité locales fonctionne bien uniquement sur un système modèle particulier ou si d'autres méthodes donnent des résultats satisfaisants dans différents solides désordonnés. De plus, les solides amorphes générés par MD sont toujours beaucoup plus ductiles que ceux des expériences réelles, et il est donc difficile de simuler des matériaux fragiles qui présentent une défaillance catastrophique.

Des développements méthodologiques récents utilisant la méthode Swap Monte Carlo (SMC) [Ninarello 2017] permettent maintenant d'équilibrer très profondément des liquides polydispersés modèles, à des températures comparables, et même inférieures, à celle qui peuvent être atteinte expérimentalement. Ces liquides, lorsqu'ils sont trempés à température nulle, forment des verres ultrastables qui présentent une rupture fragile [Ozawa 2018].

Dans le cadre d'une collaboration internationale étendue, nous utilisons ces outils informatiques pour mener une étude comparative complète et quantitative. Nous nous sommes penchés sur la capacité de plusieurs indicateurs structurels récemment proposés pour prédire l'activité plastique dans des verres modèles bidimensionnels formés à l'aide d'un large éventail de conditions de préparation. Nous développons une méthodologie standard pour comparer ces indicateurs entre eux.

Nous avons considéré 18 indicateurs différents illustrés sur la Fig. 2.4a qui peuvent être classés en cinq familles :

(a) Huit purement structuraux qui ne nécessitent que la position des particules et non leur potentiel d'interaction (rouge).

(b) Une méthode basée sur l'apprentissage automatique qui est également structurelle mais nécessite un entraînement sur un sous-ensemble de déformations de cisaillement (violet).

(c) Trois basées sur la réponse linéaire et l'analyse des modes de vibrations harmoniques sans aucune information sur la contrainte appliquée (vert).

(d) Trois qui quantifient la réponse linéaire à une déformation appliquée spécialisée, ici un simple cisaillement (bleu).

(e) Trois méthodes numériques allant au-delà de la réponse linéaire, dont la méthode des limites d'élasticité locales (orange).

Nous avons également considéré deux indicateurs supplémentaires (en noir) qui ne sont a priori pas liés à la plasticité, l'énergie potentielle locale et la dilatation thermique locale.

Nous constatons que les différentes classes d'indicateurs structurels ne sont pas toujours fortement corrélées entre elles, ce qui suggère que différents paradigmes d'identification des défauts d'écoulement puissent être sensibles à des informations

structurelles distinctes. À quelques exceptions près, les indicateurs que nous avons étudiés se montrent satisfaisant pour prédire les lieux d'instabilités plastiques dans les matériaux ductiles et fragiles sur de courtes échelles de déformation ($\sim 0.1\%$ pour les tailles de système étudiées), et plusieurs restent corrélés au-delà de $\sim 10\%$ de déformation, soulignant que la structure gouverne bien la déformation plastique de ces matériaux à température nulle sous cisaillement.

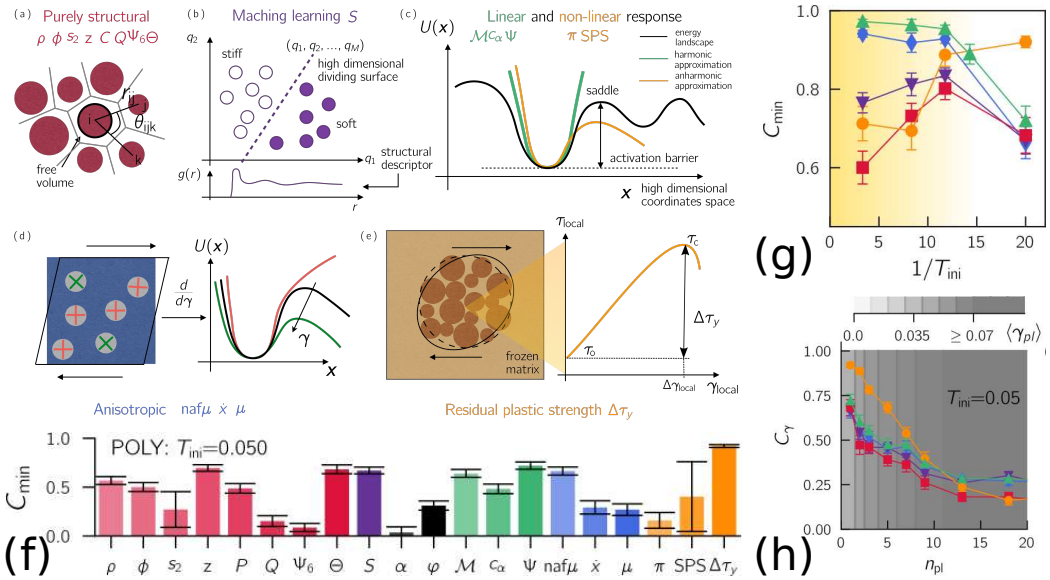

Figure 2.4 – Les différentes classes d'indicateurs : (a) Indicateurs purement structuraux. (b) Apprentissage automatique (Support Vector Machine). (c) Paysage énergétique autour d'un état inhérent du verre. Les méthodes basées sur la réponse linéaire associent les régions molles aux courbures faibles du paysage énergétique. Les méthodes anharmoniques peuvent fournir des estimations des barrières d'activation. (d) Indicateurs anisotropes également basés sur la réponse linéaire du système mais incluant la géométrie de la déformation imposée. (e) Méthode de la limite d'élasticité locale. (f) Corrélation entre un champ structurel calculé à $\gamma = 0$ et le premier événement plastique. (g) Même information en fonction de l'inverse de la température parente (stabilité du verre) dans un verre polydispersé préparé par la méthode SMC de verres peu stables à ultra stables. (h) Décroissance de la corrélation entre un champ structurel calculé à $\gamma = 0$ et le énième événement plastique. Le gradient gris sous-jacent indique la déformation plastique moyenne correspondante allant de $\gamma = 0$ (transparent) à $\gamma = \gamma_{yielding}$ (opaque). Les différentes couleurs correspondant aux meilleurs indicateurs structuraux indiqués en (f).

La qualité d'un indicateur donné varie peu entre les deux types de potentiels d'interaction que nous avons étudiés. En revanche, leurs capacités prédictives changent avec la stabilité du verre : les indicateurs sont généralement moins précis dans les verres ductiles, où de nombreuses régions sont molles même pour une déformation nulle. Une exception à cette règle se produit dans les verres ultra-stables accessibles via la méthode de SMC. Dans ces matériaux, de nombreux indicateurs structuraux changent tellement avant le premier réarrangement plastique, simplement du fait du chargement élastique, que leur champ calculé pour une déformation nulle devient peu prédictif.

Nous étudions dans un premier temps comment les indicateurs structuraux évalués à déformation nulle, $\gamma_{xy} = 0$, sont corrélés avec l'emplacement du premier événement plastique. Les figures 2.4f et g montrent la corrélation de rang cumulée C_{min} calculée comme dans la section précédente par l'Eq. 2.2 mais limitée à la première ST. Nous observons un accord qualitatif avec la section précédente avec un certain changement quantitatif de la corrélation à mesure que les échantillons deviennent plus stables.

Les indicateurs construits à partir de modes de vibration fonctionnent extrêmement bien, avec une corrélation C_{min} proche de l'unité. Ces indicateurs peuvent même être aussi performants que la résistance plastique résiduelle $\Delta\tau_y$. Ce résultat confirme de nombreuses observations selon lesquelles les emplacements des instabilités plastiques sont directement liés à la présence d'excitations à basse fréquence qui contrôlent la réponse d'un système lors d'un forçage externe.

La majorité des indicateurs basés sur la structure fonctionnent mal, à deux exceptions importantes : le paramètre d'ordre stérique Θ [Tong 2018] et le champ de « Softness » basé sur l'apprentissage automatique S [Cubuk 2015], tous deux étant fortement corrélés. Le paramètre Θ cherche à mettre en évidence les particules qui s'écartent de manière significative des configurations stériquement favorisées avec peu de chevauchements de particules, et constitue donc une mesure locale de la frustration. Le fait que Θ soit similaire à une méthode agnostique comme l'apprentissage automatique suggère que l'algorithme d'apprentissage automatique a également appris à identifier une telle frustration.

Dans la Fig. 2.4g, nous résumons nos résultats en traçant C_{min} pour les différents protocoles de trempe en les ordonnant en fonction du degré de stabilité des échantillons préparés à l'aide de la méthode SMC pour un système polydispersé. Les verres et leurs protocoles de trempe, paramétrés par la température parente d'équilibre T_{ini}, sont classés du plus ductile au plus fragile. Pour plus de visibilité, nous n'affichons que les meilleurs indicateurs structurels de chaque famille (Θ, S, $\mathcal{M}$, $naf\mu$ et $\Delta\tau_y$). Le pouvoir prédictif augmente à mesure que le système devient moins ductile, en accord avec la section précédente.

En revanche, les systèmes les plus stables que nous étudions (les points les plus à droite de la Fig. 2.4g) vont à l'encontre de cette tendance. Ceux-ci correspondent à des verres ultrastables qui ne peuvent être formés qu'à l'aide de méthode de SMC. Dans ces verres, le pouvoir prédictif des modes de vibration et de S sont tous plus faibles. Nous observons également que les méthodes basées sur l'exploration du PEL mettent en évidence que les point-cols pertinents du paysage d'énergie ne sont pas présents à $\gamma_{xy} = 0$ et ne se forment qu'au cours du chargement élastique. En revanche, la corrélation offerte par la résistance plastique résiduelle $\Delta\tau_y$ continue d'augmenter. Ceci suggère que dans des verres ultrastables, la structure trempée est

insuffisante pour prédire les premiers événements plastiques et qu'il est nécessaire d'avoir accès à la dynamique le long des branches élastiques.

Dans leur ensemble, ces résultats démontrent que les réarrangements induits par le cisaillement dans les solides amorphes sont encodés dans la structure initiale. Dans les systèmes ductiles, de nombreux indicateurs structuraux sont raisonnablement prédictifs de l'activité plastique, jusqu'à des déformations modérées. Nos travaux indiquent que deux indicateurs purement structuraux (S et Θ), ne nécessitant aucune connaissance du potentiel d'interaction et pouvant être immédiatement appliqués aux expériences, donnent des résultats comparables aux méthodes plus complexes dans les solides ductiles.

Une autre observation surprenante réside dans le fait que les modes de vibration linéaires, qui peuvent être extraits expérimentalement de la moyenne temporelle des fonctions de corrélation [Chen 2010], surpassent toutes les autres méthodes dans les matériaux ductiles. En revanche, en analysant des configurations de verre ultrastables, dont la première instabilité plastique est repoussée jusqu'à 6%-7% de déformation, nous montrons que la corrélation des indicateurs basée sur la réponse linéaire diminue considérablement. Ces résultats peuvent sembler contre-intuitifs dans la mesure où les systèmes ne subissent que des déformations élastiques réversibles.

Nous montrons qu'aucun autre indicateur, à l'exception de la résistance plastique résiduelle $\Delta\tau_y$, ne peut prédire avec précision les réarrangements pour des intervalles de déformation aussi importants. Cela indique clairement que la prise en compte du couplage entre zones molles et géométrie de chargement imposé est une clef pour une meilleure corrélation. Les travaux futurs devraient donc se concentrer sur l'amélioration des indicateurs anisotropes existants et sur le développement d'approches micromécaniques. La quantification de l'interaction et de l'auto-organisation entre excitations locales sera également cruciale pour comprendre la localisation des contraintes et la formation de localisations catastrophiques dans les verres fragiles.

2.3 Propriétés des limites d'élasticité locales : préparation, orientation et échelle de longueur

Dans les sections précédentes, nous avons montré que la méthode de la limite d'élasticité locale pouvait fournir l'un des meilleurs pouvoirs prédictifs de l'activité plastique. Au-delà de la simple corrélation, cette méthode donne accès à une observable naturelle dans le cadre de la plasticité : un seuil de contrainte critique. De plus, il s'agit d'une grandeur non perturbative, directionnelle et d'ordre $\mathcal{N}$, permettant en principe de traiter des systèmes étendus. Dans cette section, nous examinons l'impact du protocole de préparation, de la direction de chargement ainsi que la taille de la zone échantillonnée.

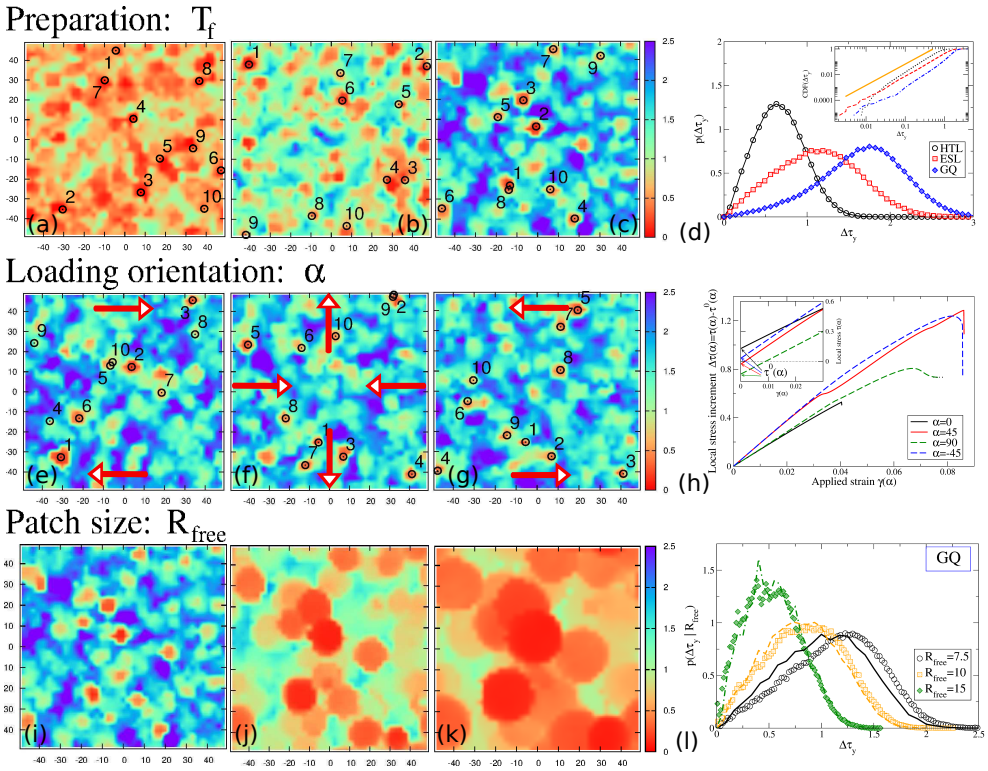

Figure 2.5 – Champs des résistances plastiques résiduelles en fonction du protocole de préparation (1re ligne), de l'orientation du chargement (2e ligne) et de la taille de l'inclusion relaxée (3e ligne). Les emplacements des dix premiers événements plastiques sont représentés par des cercles noirs numérotés par ordre d'apparition lors du chargement globale du système.
Cartes calculées pour les trois protocoles de trempe : (a) HTL, (b) ESL et (c) GQ. (d) Fonctions de distribution de probabilité correspondantes. L'encart correspond aux fonctions de répartition en échelle log-log.
Cartes calculées pour différentes directions de chargement pour le protocole GQ : (e) cisaillement simple $\alpha = 0°$, (f) cisaillement pur $\alpha = 45°$, et (g) cisaillement simple négatif $\alpha = 90°$. Les flèches rouges correspondent aux chargements macroscopiques. (h) Exemple de réponses mécaniques locales de la région I pour différentes directions de chargement.
Cartes d'un verre GQ calculées pour différentes tailles d'inclusion R_{free} : (i) 5, (j) 10 et (k) 15. (l) Fonctions de distribution de probabilité des résistances plastiques résiduelles. Les lignes correspondent à une analyse du maillon le plus faible à partir des champs calculés avec $R_{free} = 5$.

Les cartes des $\Delta\tau_y$ locaux sont présentées dans la première ligne de la Fig. 2.5 pour les trois protocoles de trempe. L'effet du protocole de trempe sur les champs des limites d'élasticité est remarquable. Plus la température pour laquelle le système tombe hors d'équilibre au cours de sa synthèse est basse, plus le verre est mécaniquement stable. Un avantage de cette méthode est qu'elle permet d'évaluer la stabilité directement aux échelles locales et non depuis la réponse globale comme reportée dans la Fig. 2.1a.

Le système HTL montre une surabondance de petites barrières d'énergie caractéristiques des systèmes mous. En revanche, le système GQ présente une faible proportion de zones molles enchâssées dans un squelette dur [Shi 2006]. Comme prévu, ESL correspond à une situation intermédiaire. Plus quantitativement, la Fig. 2.5d représente les distributions de $\Delta\tau_y$ calculées pour les trois protocoles de trempe. Les densités de probabilité $p(\Delta\tau_y)$ sont sensiblement décalées vers des valeurs plus élevées avec l'augmentation de la stabilité du système, les zones les plus faibles étant dépeuplées.

Grâce à cette méthode, nous sommes en mesure d'analyser les statistiques des sites qui sont sur le point de se réorganiser plastiquement. Des travaux antérieurs basés sur des approches théoriques de champ moyen [Lin 2016], des simulations atomistiques [Karmakar 2010b, Hentschel 2015] et des simulations mésoscopiques [Lin 2014b, Lin 2015] ont proposé une loi d'échelle pour la densité de ces zones molles tel que $\lim_{\Delta\tau_y \to 0} p(\Delta\tau_y) \sim \Delta\tau_y^{\theta}$ où θ est un exposant non trivial. Pour les systèmes au repos, après la trempe, il a été montré que $\theta \approx 0,6$ [Karmakar 2010b, Hentschel 2015], en accord avec les résultats rapportés dans l'encart de la Fig. 2.5d.

Jusqu'à présent, relativement peu d'études ont abordé la question de la variation de la susceptibilité plastique locale en fonction de l'orientation du chargement. Cette situation provient du fait que la plupart des indicateurs locaux proposés sont des grandeurs scalaires. Seuls les travaux basés sur les modes mous ont tenté d'explorer la susceptibilité vis-à-vis de l'orientation du chargement en tirant parti de l'aspect vectoriel des modes propres de vibration [Rottler 2014, Smessaert 2014]. Afin de répondre à ce problème, nous utilisons ici un autre avantage de la méthode locale des limites d'élasticité nous donnant naturellement accès à cette information directionnelle.

Des courbes contrainte-déformation de cisaillement locales sont illustrées pour quatre directions différentes sur la Fig. 2.5h. Il apparaît que la réponse mécanique dépend de l'orientation du chargement. Comme attendu dans le cadre de la théorie élastique, nous vérifions que $\tau_0(\alpha) = -\tau_0(\alpha+90°)$ et que les modules de cisaillement locaux $\mu(\alpha) = \mu(\alpha+90°)$ comme reporté dans l'encart de la Fig. 2.5h. En revanche, les résistances plastiques résiduelles $\Delta\tau_c$ ne présentent pas les symétries élastiques et dépendent de l'orientation considérée.

Afin de tester la dépendance de l'activité plastique à la direction du chargement mécanique, les verres trempés sont déformés par le protocole AQS mais suivant des orientations différentes. En plus du cisaillement simple décrit dans la Sec. 2.1.1, les systèmes sont déformés en cisaillement pur en appliquant des incréments de déformation $\Delta\gamma/2 = -\Delta\varepsilon_{xx} = \Delta\varepsilon_{yy}$ et en cisaillement simple dans le sens négatif en appliquant des incréments de déformation $\Delta\gamma = -\Delta\gamma_{xy}$. Ces chargements correspondent dans la limite des déformations infinitésimales à des cisaillements

selon les directions $\alpha_l = 45°$ et $\alpha_l = -90°$, respectivement (voir les flèches rouges sur les Fig. 2.5e, f et g). Le cisaillement pur produit donc un cisaillement orienté en diagonale. Le cisaillement simple négatif correspond à un cisaillement orienté latéralement, mais de sens opposé par rapport au chargement en cisaillement simple positif employé jusqu'à présent.

Les positions des dix premiers réarrangements plastiques pour les différentes directions de chargement sont illustrées pour un verre GQ dans la rangée du milieu de la Fig. 2.5. En accord avec [Gendelman 2015], la localisation des réarrangements plastiques montre une forte dépendance au protocole de chargement. La plupart des événements plastiques se produisent dans zones différentes en fonction du protocole. Occasionnellement, des réarrangements apparaissent aux mêmes endroits du système pour différentes orientations de chargement.

Dans le même temps, les résistances plastiques résiduelles sont également calculées à l'aide de la formule 2.1 avec les directions de chargement correspondantes α_l. Nous considérons donc $\alpha_l = 0°$, $45°$ et $90°$ pour le cisaillement simple positif, le cisaillement pur et le cisaillement simple négatif, respectivement. Les cartes de $\Delta\tau_y$ sont présentées dans la ligne du milieu de la Fig. 2.5. Une forte dépendance à l'orientation du chargement est observée. La rotation du cisaillement se traduit par l'apparition (disparition) de zones molles (dures).

À titre d'exemple, les zones proches des 1er et 3e réarrangements plastiques pour le cisaillement simple positif de la Fig. 2.5e disparaissent dans le cas du cisaillement simple négatif de la Fig. 2.5g. À l'inverse, des zones molles apparaissent comme celles proches des 5e et 7e réarrangements sur la Fig. 2.5g. Comme pour le cisaillement simple détaillé ci-dessus, le cisaillement pur et le cisaillement simple négatif montrent une excellente corrélation entre les zones molles et les zones où se produisent les réarrangements plastiques. La quantification des corrélations par Eq. (2.2) telle que décrites dans Sec. 2.1.3 est quantitativement similaire.

Nous abordons enfin l'effet de la taille du patch R_{free} sur la statistique des limites d'élasticité locales. Plusieurs mécanismes peuvent être anticipés, comme les effets de taille mécaniques et les effets d'origine statistique. Les effets de taille mécaniques correspondent aux hétérogénéités élastiques ainsi qu'à l'influence des conditions aux limites gelées. Les frontières gelées affectent en effet les résultats de simulation de la manière suivante : plus un atome est proche de la frontière, plus son déplacement est affine, déviant ainsi sa trajectoire par rapport à des simulations non contraintes. Les effets statistiques de taille jouent un rôle dans la mesure où la limite d'élasticité locale est principalement contrôlée par les zones les plus faibles du patch (appartenant à la région I). Dans cet effet de type maillon faible, on peut s'attendre à ce que son amplitude soit donnée par le plus petit seuil contenu dans le patch.

Les cartes de $\Delta\tau_y$ locales calculées pour différents R_{free} sont présentées dans la rangée inférieure de la Fig. 2.5 pour le protocole de trempe GQ. Nous observons que la variation de R_{free} modifie la statistique globale des seuils. Les fonctions de distribution des résistances plastiques résiduelles correspondantes présentées dans la Fig. 2.5l montrent que l'augmentation de R_{free} induit un déplacement significatif des distributions vers les plus petites valeurs de $\Delta\tau_y$.

De manière évidente, les cartes obtenues pour les grands R_{free} s'expliquent par l'accroissement spatial des zones centrées sur les sites les plus faibles. Les zones les plus molles ont tendance à « envahir » le verre lorsque le rayon de la zone sur laquelle le seuil de contrainte est calculé augmente. L'effet statistique semble donc prédominant. Partant de ce constat, nous essayons de comprendre les variations des distributions des limites d'élasticité locales avec R_{free}. Nous choisissons de travailler à partir des distributions observées pour une petite taille $R_{free} = 5$. Nous faisons l'hypothèse simplificatrice que tous les seuils $\Delta\tau_y(R_{free})$ des points de la grille prennent la valeur des plus petits minima locaux $\Delta\tau_y(R_{free} = 5)$ situés à l'intérieur d'un disque de rayon R_{free}.

Cette approche permet de déduire la distribution des limites d'élasticité en fonction d'une taille de patch donnée $R_{free} > 5$ à partir des distributions spatiales obtenues pour $R_{free} = 5$. Les comparaisons entre les distributions calculées pour le protocole de trempe GQ pour différents R_{free} et celles estimées à partir de notre procédure géométrique reportées sur la Fig. 2.5l montrent un accord satisfaisant. Les variations des distributions de $\Delta\tau_y$ avec R_{free} sont donc dominées au premier ordre par des effets statistiques.

L'augmentation de R_{free} joue le rôle d'un filtre passe-bas pour les seuils, déplaçant leurs distributions vers des valeurs de limites d'élasticité plus faibles. L'accord entre les distributions mesurées et les distributions déduites est néanmoins légèrement moins satisfaisant pour les systèmes moins stables et pour les grandes valeurs de R_{free}. De manière similaire au pouvoir prédictif de la localisation des STs, nous attribuons cet écart au plus grand désordre élastique et aux plus faibles contrastes des zones molles en raison de distributions de seuils plus étroites dans ces systèmes.

Chapitre 3

Mise en oeuvre des limites d'élasticité locales : localisation, polarisation et relaxations en température

---

Dans le chapitre précédent, nous avons présenté une nouvelle méthode de calcul numérique permettant d'avoir accès aux champs des limites d'élasticité locales dans des solides amorphes modèles. Nous pouvons désormais nous pencher sur leurs évolutions et leurs conséquences lors d'un chargement mécanique ou dans le cas de températures finies. L'objectif de ce chapitre est de montrer au travers d'exemples concrets comment la susceptibilité plastique locale calculée par la méthode des limites d'élasticité permet d'apporter des éléments de réponses à des questions scientifiques encore ouvertes.

Pour cela, nous étudions la déformation d'un verre stable obtenu par un protocole de trempe graduelle qui présente de la localisation de la plasticité sous la forme de bandes de cisaillement. Nous étudions l'évolution des limites d'élasticité locales en fonction de la déformation plastique et discutons de l'adoucissement observé depuis l'échelle atomique sur une base quantitative.

Un deuxième exemple traite de l'état d'écoulement stationnaire des verres dont les propriétés mécaniques sont influencées par la direction de déformation mais ne dépendent plus de la préparation initiale des systèmes. Nous montrons que la déformation plastique induit une anisotropie des propriétés mécaniques. Il s'agit de l'effet Bauschinger. Nous analysons la polarisation induite à partir des statistiques des seuils de glissement locaux nous permettant de reproduire l'anisotropie des réponses mécaniques dans les premiers stades de déformation.

Nous analysons enfin les relaxations observées dans les liquides surfondus à la lumière des propriétés mécaniques locales de leurs états inhérents obtenus par trempes instantanées. Les hétérogénéités spatiales et les fréquences de relaxation sont étudiées en fonction de la température et des champs de seuils de glissement. Ici aussi, les limites d'élasticités locales fournissent des informations précieuses et jettent un pont entre relaxations dynamiques en température et réarrangements

plastiques athermiques.

Publications associées :
• A. Barbot, M. Lerbinger, A. Lemaître, D. Vandembroucq, S. Patinet, *Rejuvenation and Shear-Banding in model amorphous solids*, Phys. Rev. E **101**, 033001 (2020).
• S. Patinet, A. Barbot, M. Lerbinger, D. Vandembroucq, A. Lemaître, *On the Origin of the Bauschinger Effect in Amorphous Solids*, Phys. Rev. Lett. **124**, 205503 (2020).
• M. Lerbinger, A. Barbot, D. Vandembroucq and S. Patinet, *On the relevance of shear transformations in the relaxation of supercooled liquids*, arXiv preprint arXiv :2109.12639 (soumis à Phys. Rev. Lett.).

Sommaire

3.1 Rajeunissement mécanique et formation des bandes de cisaillements **28**
3.2 Origine de l'effet Bauschinger dans les solides amorphes . . **33**
3.3 Connexions entre relaxations dans les liquides surfondus et propriétés mécaniques des états inhérents **37**

3.1 Rajeunissement mécanique et formation des bandes de cisaillements

Les bandes de cisaillement correspondent à une localisation intense de la déformation plastique dans des bandes étroites. Elles sont le principal mode de défaillance mécanique d'une grande variété de matériaux amorphes comprenant les verres métalliques [Greer 2013] ou les milieux granulaires [Le Bouil 2014]. Lorsque les conditions de chargement le permettent, les bandes peuvent s'étendre à travers une partie du matériau et soutenir une activité plastique répétée tout en préservant leur structure globale [Pampillo 1974]. S'il est donc clair que le matériau à l'intérieur des bandes de cisaillement est plus mou que le verre environnant non déformé, l'origine structurelle de ce contraste de dureté et les mécanismes sous-jacents de son émergence rapide restent des sujets débattus [Lewandowski 2006, Martens 2012, Nicolas 2016, Vasisht 2020b].

Les modèles mésoscopiques [Tyukodi 2016, Nicolas 2018] de plasticité représentent un verre comme un continuum élastique dans lequel des zones discrètes sont réarrangeables. Ces derniers s'avèrent capables de reproduire l'apparition des bandes de cisaillement mais à condition de postuler que les seuils locaux sont affaiblis après l'apparition des STs [Vandembroucq 2011, Tüzes 2017, Popovic 2018]. Cependant, aucune donnée atomistique n'existe pour soutenir cette idée. Dans ce travail, nous utilisons la méthode présentée dans le chapitre précédant pour accéder

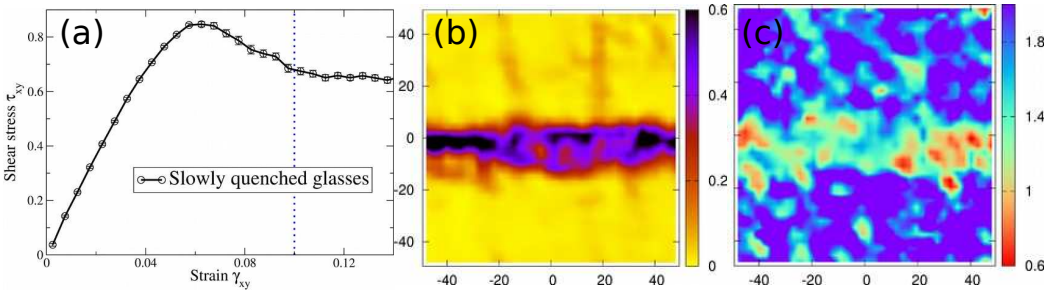

FIGURE 3.1 – (a) Contrainte de cisaillement moyenne τ_{xy} en fonction de la déformation γ_{xy} lors d'un chargement quasi-statique en cisaillement simple d'un verre stable GQ. Cartes locales pour $\gamma_{xy} = 0.1$ de (b) la déformation cumulée et (c) des limites d'élasticités τ^c_{xy}.

aux limites d'élasticité à l'échelle locale (c'est-à-dire dans des régions comprenant quelques dizaines atomes) dans des orientations arbitraires.

Les verres stables initiaux obtenus par le protocole GQ sont soumis à une déformation de cisaillement simple par la méthode AQS [Maloney 2004b] jusqu'à une déformation linéaire $\gamma_{xy} = 5$. Dans de tels systèmes fortement déformés, les déformations locales doivent être calculées en utilisant la théorie des déformations finies (voir Appendice A). Pour cela, nous utilisons une mesure scalaire de la déformation locale ε calculée à partir de la racine carrée du deuxième invariant du tenseur des déformations logarithmiques, dites de Hencky.

La réponse contrainte-déformation moyenne de l'échantillon pendant le chargement AQS à volume constant est rapportée dans la Fig. 3.1a. Elle présente un pic de contrainte caractéristique suivi d'un adoucissement. La réponse plastique de ces systèmes relaxés implique systématiquement des bandes de cisaillement comme illustré sur la Fig. 3.1b. Les cartes de champ de déformation locale, comme illustré ici à $\gamma_{xy} = 0.1$, présentent de manière générique une région de forte déformation traversant la cellule qui correspond à l'apparition d'une bande de cisaillement. Ce phénomène ne peut provenir que de causes structurelles puisque notre utilisation du cisaillement AQS exclut les effets liés aux échelles de temps [Martens 2012, Vasisht 2020a], aux vibrations mécaniques [de Arcangelis 2019], à l'inertie [Nicolas 2016] ou à l'accroissement local de la température [Lewandowski 2006].

Les limites d'élasticité locales sont mesurées dans les configurations cisaillées en utilisant la méthode décrite dans le chapitre précédent. Nous nous concentrons principalement sur les variations de seuil dans l'orientation du chargement, avec $\alpha = 0$, en raison de leur pertinence directe vis-à-vis de la réponse plastique. Pourtant, nous montrons que l'adoucissement se produit dans toutes les orientations de cisaillement. Nous soulignons de plus que nous nous concentrons ici sur la contrainte critique τ^c, et non sur la résistance plastique résiduelle $\Delta\tau^c = \tau^c - \tau$,

avec τ la contrainte locale. Si, comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, $\Delta\tau^c$ est un indicateur adéquat pour prédire la future réponse plastique, il dépend explicitement de la contrainte locale, c'est-à-dire du chargement élastique courant. Ce n'est pas le cas pour le limité d'élasticité τ^c qui constitue donc une grandeur plus intrinsèque pour décrire l'évolution des propriétés des structures locales sous chargement.

La figure 3.1c présente la carte des limites d'élasticité locales résultantes dans l'orientation du chargement $\tau^c(\alpha = 0) = \tau^c_{xy}$. En comparant avec la carte des déformations locale de la Fig. 3.1b, il est clair que le matériau dans la bande a tendance à présenter des valeurs de limites d'élasticité inférieures à celles du matériau environnant. Nous voyons donc directement ici que, comme prévu, la plasticité induit un adoucissement et donc une localisation dans la bande [Rice 1976]. Dans la suite, nous utilisons cette mesure pour mieux comprendre les mécanismes sous-jacents à la formation des bandes de cisaillement.

Dans cette perspective, nous reportons sur la Fig. 3.2a la limite d'élasticité moyenne en fonction de la déformation locale ε. Ses variations sont étudiées pour différents niveaux de chargements macroscopiques γ_{xy}. Les courbes $\langle\tau^c_{xy}\rangle$ constituent la première observation directe et quantitative de l'adoucissement local depuis l'échelle atomique. Elles décroissent systématiquement avec la déformation locale ε, sur une déformation d'ordre ε^* correspondant à la déformation caractéristique d'une ST. Cette observation clé implique que la mémoire de l'état initial s'efface après une déformation correspondant essentiellement à un réarrangement plastique, ce qui explique la rapidité du ramollissement et donc de la localisation.

Néanmoins, certaines caractéristiques de ces courbes sont surprenantes et appellent des explications supplémentaires. Tout d'abord, les régions élastiques correspondant à de très faibles déformations ($\varepsilon/\varepsilon^* \lesssim 0.1$) présentent des valeurs de limite d'élasticité plus élevées que l'état trempé. Nous montrons que ce durcissement peut être attribué principalement à un effet statistique provenant de l'élimination (de l'épuisement) progressive de l'ensemble des sites les plus faibles de l'état trempé lorsqu'ils se plastifient [Baret 2002]. Deuxièmement, il existe un écart important entre les courbes, ce qui implique que la limite d'élasticité locale dépend à la fois des ε locaux et des γ_{xy} macroscopiques. Plus précisément, à de petits γ_{xy}, les régions fortement déformées sont étonnamment plus molles que dans l'état d'écoulement (homogène) stationnaire, de sorte qu'à un ε donné, les limites d'élasticité locales augmentent avec γ_{xy}, ce qui constitue un effet de durcissement.

Pour comprendre l'origine de ce deuxième effet de durcissement, nous nous intéressons aux distributions des limites d'élasticité des zones renouvelées, c'est-à-dire qui viennent juste de subir un réarrangement plastique. Pour cela, nous sélectionnons des sites activés à la suite d'un petit incrément de déformation macroscopique $\Delta\gamma_{xy}$. Nous montrons que toutes les distributions τ^c_{xy} des sites qui

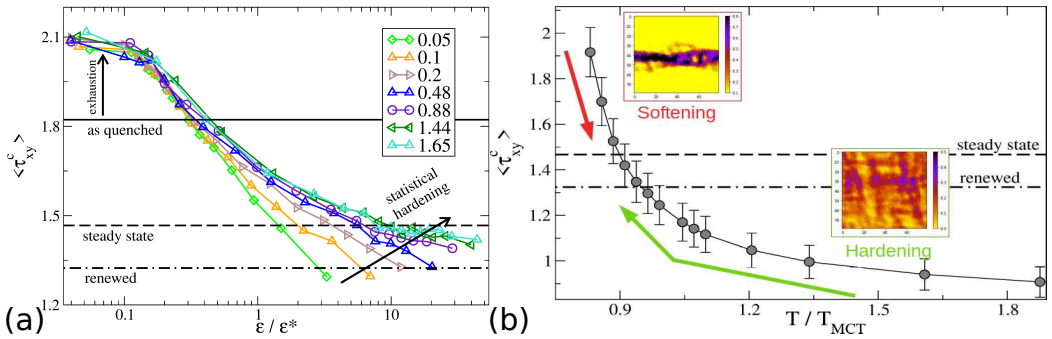

Figure 3.2 – (a) Limites d'élasticité moyennes $\langle \tau^c_{xy} \rangle$ en fonction de la déformation locale normalisée par la déformation d'un réarrangement caractéristique $\varepsilon/\varepsilon^*$ pour différentes déformations macroscopiques. Les lignes horizontales continues, en tirets et en tirets pointillés correspondent à $\langle \tau^c_{xy} \rangle$ dans les ensembles trempé, stationnaire et renouvelé, respectivement. (b) Limites d'élasticités locales moyennes $\langle \tau^c_{xy} \rangle$ des états inhérents en fonction de leur température parente. Les encarts correspondent aux champs de déformation locaux pour les états inhérents préparés au-dessus (comportement adoucissant) et en dessous (comportement durcissant) de la température critique.

viennent de se plastifier se superposent. Ceci constitue une observation clé de notre travail. Elle établit, qu'en moyenne, un événement plastique amène la structure locale dans une distribution de limite d'élasticité unique, quel que soit l'état initial.

Cette idée est souvent posée a priori dans les modèles de champ moyen [Bouchaud 1992, Sollich 1997, Hébraud 1998] ou dans les modèles mésoscopiques [Vandembroucq 2011], mais n'a jamais été observée directement. Cela implique que les bandes de cisaillement résultent d'un processus apparenté à de la nucléation par la production de structures présentant un niveau de dureté spécifique obtenues après les tous premiers réarrangements plastiques.

Le durcissement des sites plastifiés avec l'augmentation de γ_{xy} se produit en raison de l'élimination rapide des sites les plus faibles parmi les sites fraîchement renouvelés. À mesure que γ_{xy} augmente, les régions à ε fixé comprennent une fraction croissante de sites qui ont été déjà plastifiés, mais qui sont relativement durs et ont résisté depuis. C'est cet effet statistique de sélection qui explique finalement que les limites d'élasticité dans le régime stationnaire soient légèrement plus grandes que celles des sites fraîchement renouvelés.

Nous reportons enfin sur la Fig. 3.2b la moyenne $\langle \tau^c_{xy} \rangle$ calculée pour les États Inhérents (ISs) obtenus après des trempes instantanées à partir de différentes températures parentes de liquides équilibrés. La valeur $\langle \tau^c_{xy} \rangle \simeq 1.32$ des zones renouvelées est comparable à la limite d'élasticité moyenne dans les ISs d'un liquide surfondu au voisinage de $0,9\ T_{\mathrm{MCT}}$, où est T_{MCT} la température de couplage de mode en dessous de laquelle la dynamique des liquides entre dans le régime activé. Cette observation indique que les structures plastifiées possèdent des hauteurs de barrières

comparables avec celles d'un liquide se trouvant sur les couches supérieures du PEL.

Le fait que la limite d'élasticité moyenne des sites plastifiés soit comparable à celle des ISs des liquides proches de T_{MCT} constitue une caractéristique fondamentale du PELs. Cette observation offre un critère commode de localisation en fonction de la préparation du système. Elle explique pourquoi la température parente critique séparant les régimes fragiles et ductiles dans les matériaux amorphes se situe au voisinage de T_{MCT} [Ozawa 2018]. Un contraste de dureté doit en effet exister entre la matrice trempée et les sites plastifiés pour que les bandes de cisaillement puissent se former et persister. Ce résultat est de plus en excellent accord avec les résultats récents obtenus dans des simulations de cisaillement périodiques athermiques [Yeh 2019, Bhaumik 2021], montrant une transition entre rajeunissement et relaxation pour des températures parentes au voisinage de T_{MCT}.

Ce travail constitue un premier pas dans l'étude des processus de rajeunissement des contraintes d'écoulement à l'échelle atomique dans un verre modèle. Il apporte des observations directes qui contraignent fortement à la fois les hypothèses des modèles, notamment sur l'effet du rajeunissement, et les prédictions des modèles concernant la dynamique des seuils locaux. Grâce à l'étude d'un système présentant des bandes de cisaillement, c'est-à-dire comprenant des structures aux propriétés hétérogènes, nous avons pu démontrer qu'il existait une distribution de limites d'élasticité des zones plastifiées bien définie, peu sensible à l'état initial.

De plus, nous avons constaté que le rajeunissement était un processus étonnamment rapide, ne nécessitant essentiellement qu'un seul événement plastique pour amener les structures locales à un niveau de dureté bien défini, comparable à celui d'un IS obtenu à partir d'un liquide surfondu autour de T_{MCT}. Ces observations fournissent des éléments de compréhension concernant la formation des bandes de cisaillement dans les systèmes amorphes. Nous avons en effet montré que le rajeunissement provoquait une baisse abrupte des limites d'élasticité, immédiatement après les premiers événements.

La rapidité de ce processus explique qu'en partant d'un verre stable, seuls quelques événements plastiques suffisent pour effacer localement la mémoire de la structure initiale et déclencher l'instabilité mécanique sous forme de bandes de cisaillement. La proximité de la distribution de seuils des sites plastifiés avec celle d'un verre préparé au voisinage de T_{MCT} offre de plus un critère commode pour comprendre la transition fragile-ductile en fonction du protocole de préparation.

3.2 Origine de l'effet Bauschinger dans les solides amorphes

L'effet Bauschinger [Bauschinger 1886] correspond à une anisotropie des propriétés mécaniques due à la déformation plastique. Il se manifeste par une dureté plus élevée des matériaux déformés suivant la direction de déformation initiale par rapport à la direction inverse. Initialement observé dans les métaux [Buckley 1956, Asaro 1975], ce phénomène a été mis en évidence dans les polymères [Senden 2010], et plus récemment dans les matériaux amorphes comme les verres métalliques [Deng 1989, Karmakar 2010a, Frahsa 2013, Sun 2014]. On le retrouve ainsi dans presque toutes les classes de matériaux. Son origine reste pourtant un sujet de débats dans les disciplines concernées.

Notre intérêt ici est de comprendre l'origine de l'effet Bauschinger dans les solides amorphes. Il s'agit d'un objectif d'autant plus difficile qu'il n'existe pas aujourd'hui de consensus sur la manière de décrire l'état interne d'un verre [Spaepen 1977, Shi 2007, Sollich 1997] en vue de prédire sa réponse mécanique. Peu de travaux numériques existent sur l'effet Bauschinger dans les amorphes. Procaccia et ses collègues ont montré une signature d'asymétrie dans les dérivées d'ordre élevé d'énergie potentielle [Karmakar 2010a]. Dans un modèle de silice, Rountree et al [Rountree 2009] ont observé l'émergence d'une anisotropie structurale décrite à partir du tenseur de texture [Radjai 2004] classiquement associée à l'asymétrie structurale dans les matériaux granulaires [Rothenburg 2004].

Ces résultats restent cependant difficiles à relier à une image physique des mécanismes d'écoulement dans l'esprit des modèles mésoscopiques ou de champ moyen [Sollich 1997, Falk 1998, Hébraud 1998]. Rodney et Schuh [Rodney 2009] ont utilisé la méthode ART [Malek 2000] pour échantillonner les barrières d'un système cisaillé. Ils montrent une signature de polarisation des déformations associées aux franchissements des barrières d'énergie [Argon 1979a], mais n'ont pas pu la relier directement à l'effet Bauschinger.

La figure 3.3a illustre les protocoles de déformation mis en œuvre pour mettre en évidence l'effet Bauschinger. Nous partons de configurations d'écoulement stationnaires, afin de souligner que cet effet n'est pas lié à la réponse transitoire du verre, dépendante de la préparation, du durcissement ou de l'adoucissement initial. Le système est ensuite déchargé et amené à un état de contrainte nulle à partir duquel les réponses mécaniques de rechargement et de chargement inverse sont calculées. Les résultats atomistiques correspondants sont reportés sur la Fig. 3.3b. Dans cette figure, l'origine de la déformation correspond aux états de contrainte nulle atteints après le déchargement depuis les configurations d'écoulement stationnaire. La relation contrainte-déformation de déchargement (en bleu) est presque élastique. Une petite (moins de $\simeq 0.6\%$) mais nette hystérèse est observée lors du rechargement

(vert) impliquant que le déchargement induit une faible déformation plastique. La courbe de chargement inverse (rouge) montre un comportement considérablement plus mou que celui du rechargement (vert) — Il s'agit de l'effet Bauschinger.

Pour comprendre l'origine de ce phénomène, nous analysons les configurations d'écoulement stationnaire en utilisant la méthode des limites locales d'élasticité. Les orientations de déformation sont définies de telle sorte que $\alpha = 0$ lorsque la déformation est alignée avec la direction de cisaillement simple ; $\alpha = \pi/2$ est donc aligné avec le chargement inverse. Dans l'ensemble stationnaire, nous montrons que les distributions de distance au seuil $\Delta\tau^c(\alpha)$ sont nettement anisotropes. Plus précisément, elles sont polarisées dans le sens où elles présentent une asymétrie. La valeur moyenne des résistances plastiques résiduelles $\langle\Delta\tau^c\rangle(\alpha)$ est décalée de $\chi = \frac{1}{2}\left(\langle\Delta\tau^c\rangle(0) - \langle\Delta\tau^c\rangle(\pi/2)\right)$, une quantité que nous appelons polarisation moyenne. Dans l'état stationnaire nous observons $\chi^{\text{flow}} \simeq -0.31$. Les inclusions sont donc en moyenne plus proches des barrières vers l'avant ($\alpha = 0$). Cet effet est attendu puisque l'état d'écoulement stationnaire est obtenu pour une contrainte moyenne de chargement positive $\overline{\tau}_{xy}^{\text{flow}} = 0.53$.

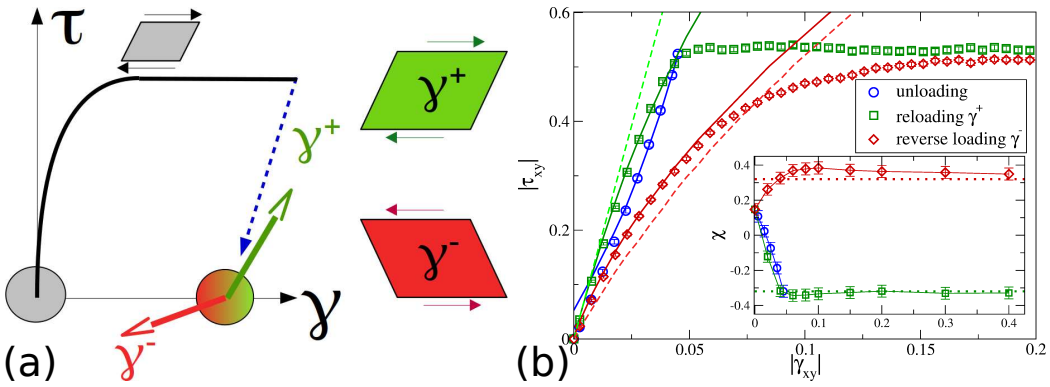

Figure 3.3 – (a) Schéma du trajet de chargement. L'état trempé, statistiquement isotrope, est déformé jusqu'à l'état d'écoulement stationnaire (ligne noire) puis déchargé jusqu'à l'état de contrainte nulle (pointillés bleus). Le système est alors rechargé soit vers l'avant (flèche verte) soit vers l'arrière (flèche rouge). (b) Contrainte moyenne en fonction de la déformation (les deux en valeurs absolues) mesurée par rapport à l'état de contrainte nulle. Les lignes continues correspondent aux prédictions du modèle utilisant les distributions des résistances plastiques résiduelles dans l'état déchargé. Les tirets montrent les prédictions lorsque le modèle utilise seulement les distributions de l'état stationnaire. Encart : évolution correspondante des polarisations moyennes $\chi = 1/2\langle\Delta\tau^c(\alpha = 0) - \Delta\tau^c(\alpha = \pi/2)\rangle$. Leurs valeurs asymptotiques sont représentées par les lignes pointillées.

Le déchargement inverse la polarisation moyenne des barrières avec $\chi^{\text{unloaded}} \simeq 0.14 > 0$. Les zones du matériau sont alors, en moyenne, plus proches des barrières inverses. Cette observation rappelle la notion de « backstress », un paramètre phénoménologique représentant le déplacement de la surface de charge en fonction de la déformation [Lemaitre 1990]. Dans les théories conti-

nues de la plasticité, bien que cela ait été récemment remis en cause dans les cristaux [Queyreau 2021], ce paramètre est supposé refléter une asymétrie de contrainte locale à l'origine de l'effet Bauschinger [Asaro 1975, Mughrabi 1988]. En contradiction avec cette vision classique, nous observons dans notre système que la distribution des contraintes locales des états déchargée est presque parfaitement symétrique. La distribution des barrières (et son asymétrie) est donc déterminée par un processus de sélection, intrinsèque à la dynamique des écoulements plastiques : la production de nouveaux seuils (rajeunissement) et l'élimination préférentielle des seuils faibles dans la direction de chargement.

L'évolution de χ avec la déformation est reportée dans l'encart de la Fig. 3.3b pour les trois tests mécaniques considérés. Les distributions de seuils développent une asymétrie avant-arrière dépendant de l'histoire et qui s'inverse lors du déchargement soulevant la question du lien possible entre cette polarisation mécanique et l'effet Bauschinger. Nous observons que χ dépasse sa valeur stationnaire (lignes pointillées de l'encart de la Fig. 3.3b) lors des rechargements. Ce paramètre moyen n'est donc pas suffisant pour caractériser l'état du matériau. De plus, si c'était le cas, la distribution des barrières retrouverait leur symétrie lorsque χ tend vers 0, ce qui n'est pas le cas après inspection des distributions $p(\Delta\tau^c(\alpha))$. Ces dernières restent asymétriques même pour $\chi = 0$.

Il reste à comprendre comment l'asymétrie avant-arrière des distributions des barrières peut jouer un rôle dans l'effet Bauschinger. Pour cela, nous rappelons que, dans un protocole AQS, la plasticité se produit lorsque les STZs sont amenés mécaniquement au-delà des seuils de glissement locaux. Par conséquent, la réponse plastique dans les premiers stades de déformation doit résulter principalement du franchissement des plus petites résistances plastiques résiduelles dans l'orientation du forçage externe. Cette observation pointe vers le rôle central de l'asymétrie avant-arrière des queues des distributions $p(\Delta\tau^c(\alpha))$, qui, comme χ, sont inversées lors du déchargement.

Cette idée est testée quantitativement en construisant un modèle élémentaire reliant la réponse plastique à la distribution des barrières. Trois types de chargement sont considérés : les deux tests de Bauschinger, ainsi que le déchargement à partir de l'état stationnaire. Pour les trois cas considérés, nous avons examiné les événements plastiques dans les premiers pourcentages de déformation et avons constaté qu'ils impliquaient généralement des réarrangements isolés, ce qui confirme que la dynamique des avalanches est inactive et que, par conséquent, le bruit mécanique peut être négligé ici. Puisque nous cherchons à capturer uniquement le début de la réponse mécanique, nous négligeons également le rajeunissement. Nous supposons donc que la plasticité dans les premiers stades de la déformation résulte exclusivement d'instabilités de seuils fixes τ^c_{xy}, préexistants dans l'état initial. En négligeant

les hétérogénéités élastiques, la variation de contrainte macroscopique s'écrit alors :

$$\delta\overline{\tau}_{xy} = \delta\overline{\tau}^{\mathrm{el}}_{xy} - \delta\overline{\tau}^{\mathrm{pl}}_{xy} = \mu\delta\gamma_{xy} - 2\mu\rho a^2\Delta\varepsilon_0 \int_0^{\delta\overline{\tau}_{xy}} p\left(\Delta\tau^c_{xy}\right) \mathrm{d}\Delta\tau^c_{xy}, \tag{3.1}$$

où p est la distribution des résistances plastiques résiduelles dans la direction de forçage considéré, a est la taille moyenne d'une ST, $\Delta\varepsilon_0$ sa déformation caractéristique et ρ est une densité spatiale de ST.

Une fois $\rho\, a^2\Delta\varepsilon_0$ déterminé (soit à partir des courbes de décharge, soit par mesures directes des paramètres moyens), l'Eq. 3.1 fournit des prédictions sans paramètre ajustable pour les deux tests de Bauschinger de chargement avant et arrière à partir de l'état de contrainte nulle. Les courbes résultantes reportées sur la Fig 3.3b montrent un accord remarquable. Ce résultat établit que l'effet Bauschinger résulte de l'asymétrie avant-arrière des queues des distributions de seuils, typiquement pour $\Delta\tau^c_{xy} \lesssim 0.5$, correspondant au changement de contrainte macroscopique sur la plage reproduite par le modèle.

La remarquable capacité du modèle à tenir compte conjointement des trois tests mécaniques confirme que son hypothèse de base (les barrières sont mécaniquement déplacées par les contraintes macroscopiques jusqu'aux instabilités) est tout à fait raisonnable jusqu'à des déformations de l'ordre de quelques pour cent. Cette observation légitime l'utilisation du modèle pour comprendre comment le déchargement conduit à l'asymétrie des distributions de barrières qui, comme nous venons de le discuter, est responsable de l'effet Bauschinger.

Dans cet esprit, nous observons qu'une estimation raisonnable de $p\left(\Delta\tau^c_{xy}\right)$ dans l'état déchargé est fournie par la distribution du régime stationnaire simplement décalée par $\overline{\tau}^{\mathrm{flow}}_{xy}$ (et tronquée pour refléter l'élimination des zones instables $\Delta\tau_{xy} < 0$). Pour tester cette interprétation, nous calculons les prédictions du modèle pour les tests de Bauschinger, sans utiliser les distributions mesurées dans l'état déchargé comme paramètre d'entrée, mais en partant de la distribution de l'état stationnaire décalée par $\overline{\tau}^{\mathrm{flow}}_{xy}$. Les courbes de réponse prédites sont représentées sur la Fig. 3.3b (avec des tirets) : le rechargement est strictement élastique ; le chargement inverse correspond à la continuation du déchargement. Ces courbes présentent clairement un effet Bauschinger d'amplitude très raisonnable, bien que légèrement surestimée.

Ce résultat confirme sans ambiguïté que les écarts par rapport aux prédictions du modèle ne reflètent que des mécanismes de compensation. Ils proviennent des hypothèses simplificatrices sur le bruit mécanique et le rajeunissement. L'hypothèse du décalage par $\overline{\tau}^{\mathrm{flow}}_{xy}$ des distributions de l'état stationnaire capture quant à lui le mécanisme central responsable de l'asymétrie des petits seuils induite par le déchargement, et conduisant à l'effet Bauschinger. De plus, nous notons enfin que le modèle prédit qu'un effet Bauschinger existe même à des niveaux de décharges partielles et

que l'anisotropie de propriétés associée croît avec le déchargement. Cette prédiction est également confirmée par des simulations.

3.3 Connexions entre relaxations dans les liquides surfondus et propriétés mécaniques des états inhérents

Lorsqu'elles sont refroidies assez rapidement, la plupart des substances évitent la cristallisation et forment un verre [Cavagna 2009]. Avant d'atteindre la transition vitreuse, elles sont piégées dans l'état métastable de liquide surfondu dont le temps de relaxation diverge lorsque la température baisse et présentent des dynamiques complexes [Keys 2011] marquées par la présence d'hétérogénéités dynamiques [Ediger 2000]. Un problème fondamental de la matière condensée non résolu jusqu'à présent est qu'il est extrêmement difficile d'identifier une signature structurelle associée à ce changement radical de dynamique.

Des avancées majeures récentes reposent sur l'identification des structures dites localement favorisées [Malins 2013] et soulignent la nécessité d'employer une description localement moyennée de la structure [Berthier 2007, Tong 2018, Boattini 2021]. Des progrès remarquables ont également été réalisés grâce à des descriptions basées sur des paramètres d'ordre à N-corps [Tong 2019, Tong 2020] ou aux méthodes d'apprentissage automatiques [Bapst 2020, Boattini 2020].

Bien que ces différentes approches aient établi un lien sans précédent entre dynamique locale et structure, la plupart d'entre elles reposent sur des quantités scalaires, c'est-à-dire qui ignorent les dépendances vis-à-vis de l'orientation. De plus, les mécanismes sous-jacents des processus de relaxation sont encore débattus. Des résultats contrastés ont été rapportés dans la littérature montrant que les excitations thermiquement activées des systèmes vitreux peuvent prendre la forme de sauts atomiques [Vollmayr-Lee 2004], de « string motion » [Donati 1999] et de cisaillements locaux [Widmer-Cooper 2009]. Dans tous les cas, la structure spatiale des relaxations tend à se localiser avec la décroissance de la température [Coslovich 2019, Shimada 2021].

Une approche prometteuse pour comprendre la relaxation des liquides surfondus consiste à inverser le problème en considérant les liquides très visqueux comme des solides qui s'écoulent [Dyre 2006]. La justification de cette approche repose sur la description des liquides du point de vue du PEL [Goldstein 1969]. Suivant cette image, pour des températures suffisamment basses, le système passe le plus clair de son temps à vibrer autour de minima d'énergie potentielle, avant de sauter rapidement vers d'autres minima, et ce, d'autant plus que la température est proche de la température de transition vitreuse. La dynamique du liquide peut ainsi être décrite par une succession de ISs [Heuer 2008]. Plus qu'une simple simplification de la dynamique, cette description solide des liquides a permis de comprendre des

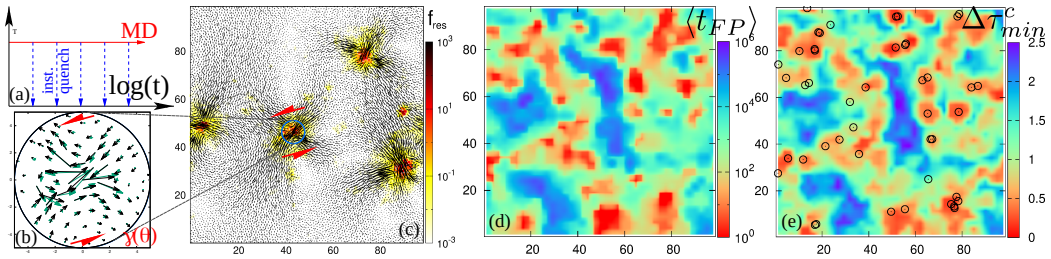

Figure 3.4 – (a) Les états inhérents (ISs) sont obtenus par trempes instantanées à partir des trajectoires de dynamique moléculaire. (b) Champs de déplacement non affine normalisés d'un réarrangement thermique entre deux ISs (flèches noires) et calculé à partir de la méthode locale (flèches turquoises) maximisant la corrélation au voisinage de la direction la plus molle. (c) Champs de déplacement lointain (flèches) et de réponse linéaire f_{res} (couleurs) correspondants. (d) Temps de premier passage moyen $\langle t_{FP} \rangle$ et (e) résistance plastique résiduelle dans la direction la plus molle $\Delta\tau^c_{min}(t=0)$ pour un liquide à $T = 0.32$. Les cercles correspondent à l'emplacement des 50 premiers réarrangements thermiques isolés.

aspects fondamentaux des liquides visqueux à partir d'une description mécanique de leur ISs [Del Gado 2008].

Les modes mous de vibrations ont ainsi été associés à des réarrangements irréversibles [Widmer-Cooper 2008, Mosayebi 2014], une échelle d'énergie caractéristique non arrhénienne a été identifiée dans les liquides fragiles [Lerner 2018, Kapteijns 2021] et la présence de corrélations de contraintes anisotropes à longue portée expliquée [Lemaître 2014]. Toutes ces études soulignent l'importance des excitations localisées. Cependant, un lien direct entre les relaxations locales dans les liquides et les propriétés mécaniques des ISs reste à établir.

Le but de notre travail est ici de démontrer comment les directions faibles sont liées aux fréquences de relaxations locales dans les liquides surfondus. Pour cela, nous profitons de la méthode des limites d'élasticité locales donnant accès à la résistance plastique résiduelle sous cisaillement $\Delta\tau^c$. Des simulations de MD sont effectuées dans l'ensemble NVT dans une boîte de simulation munie de conditions aux limites périodiques. Les résultats sont analysés à partir de 20 échantillons indépendants simulés à trois températures $T = 0.5$, 0.351 et 0.32, situées respectivement autour des températures T_{onset}, T_{MCT} (voir l'annexe A) et dans un régime en dessous duquel l'échantillonnage à l'équilibre de la dynamique avec la MD classique devient numériquement problèmatique. Le temps de relaxation t_α diverge lorsque la température diminue. Nous obtenons $t_\alpha = 7$, 243 et 10999, de la T la plus haute à la plus basse.

Les ISs sont générés au cours de la MD en trempant instantanément les configurations dynamiques à des intervalles de temps distribués logarithmiquement (voir Fig. 3.4a). La cinématique des liquides surfondus peut alors être grandement simplifiée et réduite à une séquence de ISs en supprimant les vibrations thermiques.

L'étude des dynamiques inhérentes permet de se focaliser sur l'influence du paysage énergétique sous-jacent [Heuer 2008]. Dans les Fig. 3.4b et c, nous montrons respectivement les champs typiques de déplacement au coeur et à longue distance des réarrangements thermiques $\overrightarrow{u}_{th}$ entre deux ISs. Nous observons une forte localisation de $\overrightarrow{u}_{th}$ autour de réarrangements.

Les champs de déplacement au cœur de ces réarrangements localisés montrent un large éventail de comportements, allant de sauts atomiques uniques à des modes de déformations plus étendus et complexes. Cependant, un attribut frappant des champs $\overrightarrow{u}_{th}$ réside dans la présence à longue portée de symétries quadrupolaires autour des réarrangements comme le montre la Fig. 3.4c. Cette propriété est caractéristique des STs plastiques, et du champ élastique de type Eshelby associé, plus communément discuté dans le contexte de la plasticité athermique des amorphes [Maloney 2006a]. Il s'agit d'un indice fort en faveur du caractère cisaillant des événements activés thermiquement dans les liquides surfondus [Widmer-Cooper 2009]. De plus, comme le montre la Fig. 3.4b, en se concentrant sur le cœur des réarrangements thermiques, nous observons des champs de déplacement similaires à ceux produits sous cisaillement par la méthode des limites d'élasticité locales introduite dans le Chap. 2.

Afin de souligner l'influence de la structure et de minimiser l'effet des fluctuations thermiques, nous effectuons des simulations de MD dans l'ensemble isoconfigurationnel. Dans cet ensemble, plusieurs répliques indépendantes sont simulées en utilisant la même configuration initiale mais en utilisant des vitesses initiales aléatoires différentes générées à partir d'une distribution de Maxwell-Boltzmann [Widmer-Cooper 2004]. Dans cette étude, 100 répliques sont simulées pour chaque configuration de départ. Cette approche nous permet de définir la propension (« propensity » en anglais) comme le déplacement carré moyen $\langle \Delta r^2(t) \rangle$ et le temps de premier passage local t_{FP}. Les moyennes isoconfigurationnelles des temps de premier passage $\langle t_{FP} \rangle$ rapportées sur la Fig. 3.4d montrent des hétérogénéités dynamiques, caractéristiques des liquides surfondus.

Nous calculons dans les ISs initiaux les résistances plastiques résiduelles $\Delta\tau^c$ et les comparons aux observables dynamiques. Alors que l'isotropie prévaut au sens statistique, les valeurs des résistances résiduelles d'une inclusion donnée sont fortement dépendantes de la direction de cisaillement local, reflétant ainsi le caractère désordonné de la structure amorphe. Pour les liquides, les excitations induites thermiquement sont statistiquement isotropes. Nous nous attendons donc à ce que la fréquence des relaxations locales soient sensibles aux seuils de contrainte le long des directions les plus faibles : $\Delta\tau^c_{min} = \min_\alpha \Delta\tau^c(\alpha)$. Nous considérons donc cette direction locale la plus molle α_{min} dans la suite.

Dans les Fig. 3.4d et e, nous comparons les cartes $\langle t_{FP} \rangle$ et $\Delta\tau^c_{\min}$. Leur similitude est remarquable. Plus une région est molle, plus sa relaxation est rapide.

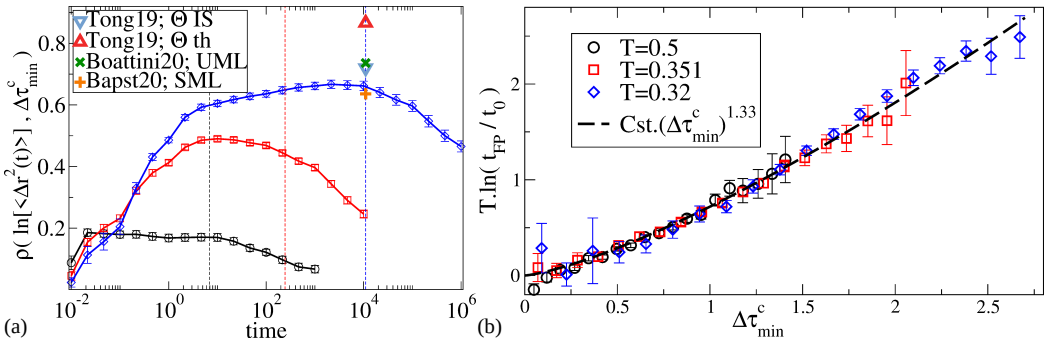

Figure 3.5 – (a) Corrélations de Pearson entre $\Delta\tau^c_{min}(t=0)$ et la propensité dynamique en fonction du temps. Les symboles épais correspondent aux meilleurs résultats de la littérature. (b) Barrière d'énergie effective $\Delta U = T.ln(\langle t_{FP}\rangle/t_0)$ estimée à partir du temps de premier passage moyen en fonction de la résistance plastique résiduelle $\Delta\tau^c_{min}(t=0)$. Le temps caractéristique t_0 est ici un paramètre ajusté pour superposer les données. La ligne en tirets montre un ajustement en loi de puissance.

À titre d'exemple, les 50 premiers événements thermiques isolés d'une trajectoire de MD particulière sont rapportés sur la Fig 3.4e. Ces derniers sont systématiquement situés dans les zones les plus molles.

La corrélation de Pearson ρ entre les champs $\Delta\tau^c_{\text{min}}(t=0)$ et $\ln[\langle\Delta r^2(t)\rangle]$ est tracée en fonction du temps sur la Fig. 3.5a. Nous observons que la corrélation augmente avec le temps au fur et à mesure que les relaxations thermiques successives s'accumulent, avec un pic autour de t_α. La corrélation avec le champ $\langle t_{FP}\rangle$ est quantitativement très proche de celle avec $\langle\Delta r^2(t=t_\alpha)\rangle$. De manière notable, pour la température la plus basse, nous observons une corrélation maximale comparable aux corrélations maximales obtenues à partir d'approches avancées d'apprentissage automatique [Bapst 2020, Boattini 2020] et, dans les ISs au moins, à celles obtenues à partir des paramètres d'ordre à N-corps proposés dans [Tong 2019].

Une fois la corrélation établie, nous discutons maintenant de la relation quantitative entre t_{FP} et $\Delta\tau^c_{min}$. L'énergie d'activation effective est ajustée en supposant une loi d'Arrhenius de la forme $t_{FP} = t_0 e^{\Delta U/T}$ avec t_0 un préfacteur et ΔU la barrière d'énergie. La dépendance à la température du temps caractéristique t_0 n'est pas prise en compte et t_0 est utilisé ici comme paramètre ajustable permettant de superposer les résultats obtenus à différentes températures. La figure 3.5b offre un lien quantitatif pour estimer les taux de franchissement des barrières à température finie en examinant la loi d'échelle $\Delta U \propto (\Delta\tau^c_{min})^\beta$.

Nos résultats semblent compatibles avec les prédictions de la théorie des catastrophes [Johnson 2005], prédisant $\beta = 3/2$, et qui est valable pour une gamme finie de distance au seuil (c'est-à-dire valable pas seulement dans les voisinages immédiats des point-cols) [Maloney 2006b]. L'ajustement des données donne néanmoins un exposant $\beta \approx 1.33$, en bien meilleur accord avec la loi d'échelle

fournie par l'analyse des excitations quasi-localisées non linéaires [Kapteijns 2020] pour laquelle $\beta = 4/3$ est calculé.

Dans ce travail, nous avons établi une forte corrélation entre les résistances plastiques résiduelles dans les directions les plus faibles et la dynamique des liquides surfondus. Plus les zones des ISs sont molles, plus la région locale des liquides correspondants est rapide. Un avantage de cette image par rapport aux approches purement structurelles est qu'elle fournit une interprétation simple dans l'espace réel des relaxations en tant qu'événements de cisaillement localisés dans les directions faibles. Parmi les chemins de transition possibles, un cisaillement local permet en effet aux particules de s'échapper de leur cage tout en conservant une majorité de leurs voisins initiaux et pour un coût en énergie élastique à longue portée modéré.

En outre, il s'agit d'un mécanisme qui remplit certains critères essentiels dans le cadre des questions relatives à la transition vitreuse, qu'ils soient empiriques ou théoriquement motivés. En effet, en tant que contrainte locale, $\Delta\tau^c_{min}$ est une grandeur naturellement moyennée localement [Berthier 2007, Tong 2018]. Un cisaillement local implique de plus un mouvement coopératif recherché dans des scénarios de type Adam-Gibbs [Cavagna 2009] et les interactions élastiques induites à longue portée fournissent un support intuitif à l'image de la facilitation dynamique [Keys 2011]. En mettant en évidence le rôle central joué par la mécanique des ISs, ces résultats pourraient également être utiles pour mieux comprendre l'apparition de la rigidité [Coniglio 2004] et la relaxation des verres à basse température [Yu 2015].

Chapitre 4

Approche multi-échelle : des simulations atomistiques aux modèles mésoscopiques

---

Jusqu'ici, nous avons discuté de la plasticité de systèmes amorphes modèles analysés à partir de simulations atomistiques. Dans ce dernier chapitre, nous traitons d'une description de la déformation plastique à une échelle supérieure dans le cadre de modèles élasto-plastiques dont les degrés de liberté correspondent à une échelle mésoscopique.

Pour cela, nous réalisons des simulations de modèle mésoscopique considérant un milieu discret où chaque élément est traité comme une zone réarrangeable sous cisaillement et en interaction élastique avec les autres éléments. Dans ce modèle simplifié, les seuils de glissement sont en général générés à partir de distributions aléatoires posées a priori. Ici, nous cherchons à réaliser une transition d'échelle plus quantitative en calibrant les propriétés du modèle élasto-plastique sur les données directement calculées à partir des simulations atomistiques des verres modèles présentés dans les chapitres précédents. Les réponses mécaniques globales et locales du modèle élasto-plastique sont comparées quantitativement aux simulations atomistiques.

Cette approche est d'abord réalisée dans l'état stationnaire d'écoulement dans le régime athermique. La calibration permet d'établir une échelle de longueur correspondant à la taille des événements plastiques (un paramètre physique clé des modèles) et de faire ressortir naturellement des propriétés spécifiques non calibrées. Nous étudions en outre l'impact des différents ingrédients des modèles pour développer des stratégies de modélisation multi-échelle plus cohérentes. L'approche est ensuite étendue à l'état transitoire en traitant de la réponse mécanique depuis des états trempés obtenus à partir de différents protocoles de préparation.

Publications associées :
• B. Tyukodi, S. Patinet, S. Roux and D. Vandembroucq, *From depinning transition to plastic yielding of amorphous media : A soft-modes perspective*, Phys. Rev. E **93**, 063005 (2016).
• D. Fernández Castellanos, S. Roux and S. Patinet, *History dependent plasticity of glass : a mapping between atomistic and elasto-plastic models* (soumis à Acta Mater.).
• D. Fernández Castellanos, S. Roux, S. Patinet, *Insights from the quantitative calibration of an elasto-plastic model from a Lennard-Jones atomic glass*, Comptes Rendus Physique de l'académie des sciences, Special Issue :Plasticity and Solid State Physics **22** (S3), 1 (2021).

Sommaire

4.1 Transition quantitative entre modèles atomistique et élasto-plastique dans l'état stationnaire d'écoulement . . . 44
4.1.1 Construction du modèle élasto-plastique 46
4.1.2 Calibration du modèle élasto-plastique 48
4.1.3 Échelle de longueur et ingrédients clés 51
4.2 Extension au régime transitoire et effet du protocole de trempe 54
4.2.1 Développement du modèle élasto-plastique au régime transitoire 54
4.2.2 Réponse mécanique dans le régime transitoire 56
4.3 Conclusion du chapitre 58

4.1 Transition quantitative entre modèles atomistique et élasto-plastique dans l'état stationnaire d'écoulement

Les approches multi-échelles visent à acquérir une compréhension de la relation entre les propriétés microstructurales et l'activité plastique. Un ingrédient essentiel pour une approche multi-échelle réussie consiste à établir des liens physiquement justifiés entre les descriptions atomistiques et continues à l'échelle macroscopique. Dans cette perspective, les approches élasto-plastiques à l'échelle mésoscopique constituent une étape intéressante.

Ces approches considèrent en effet un milieu continu discret. Des règles locales stochastiques régissent l'évolution de propriétés structurelles physiquement faciles à interpréter [Jagla 2010, Nicolas 2014, Karimi 2017]. De plus, les modèles élasto-plastiques permettent de reproduire qualitativement la phénoménologie associée à la plasticité des amorphes dans de nombreuses conditions : cisaillement quasi statique [Tyukodi 2016], taux de déformation fini [Liu 2016, Homer 2009] et fluage [Castellanos 2019]. Cette simplicité et cette polyvalence peuvent aider

à établir des liens entre physique statistique et les formulations continues de la plasticité.

Néanmoins, le manque de compréhension des mécanismes élémentaires de déformation dans les solides amorphes a jusqu'ici entravé le développement des stratégies multi-échelles, et les modèles élasto-plastiques sont ainsi restés largement phénoménologiques. Un ingrédient fondamental des modèles élasto-plastiques correspond à la susceptibilité locale au cisaillement [Tsamados 2009, Tanguy 2010, Ding 2014, Cubuk 2015, Patinet 2016]. De ce point de vue, et parmi toutes les alternatives proposées, les limites d'élasticité locales introduites dans les chapitres précédents présentent une voie prometteuse.

De plus, la méthode des limites d'élasticité facilite la collecte de statistiques de différentes propriétés locales qui sont traditionnellement difficiles d'accès telles que l'amplitude et la direction des réarrangements [Barbot 2018], le rajeunissement structurel [Barbot 2020] ou l'anisotropie des surfaces de charge [Patinet 2020]. Ces propriétés remarquables n'ont cependant pas encore été exploitées pour combler les lacunes des modèles élasto-plastiques en vue d'une description plus quantitative.

Combler cette lacune est l'objectif de ce travail dans lequel nous comparons, aussi quantitativement que possible, les modèles atomistiques et élasto-plastiques aux échelles globales et locales en tirant parti des avantages de la mesure introduite dans le Chap 2. Nous préparons des échantillons de verres atomistiques déformés dans la limite AQS jusqu'à l'état d'écoulement stationnaire en utilisant les mêmes systèmes et méthodes simplifiés que ceux présentés dans les chapitres précédents. Les propriétés mécaniques locales des verres trempés et des états stationnaires d'écoulement sont mesurées avec la méthode des limites d'élasticité locales à différentes échelles de longueur et pour différentes orientations de cisaillement.

Nous développons en parallèle un modèle élasto-plastique comportant des propriétés structurelles statistiquement distribuées et imitons le protocole de préparation et de chargement des simulations atomistiques. Motivés par les observations atomistiques locales montrant des surfaces de charges anisotropes, nous modélisons la possibilité de réarrangements plastiques à l'aide d'un ensemble de plans faibles discrets pour chaque élément du modèle. Nous étudions les conséquences de cette nouvelle caractéristique en termes de calibrage du modèle et d'anisotropie plastique induite. La comparaison des comportements aux échelles locales est réalisée en mesurant la réponse de différents sous-ensembles de la matrice élasto-plastique en mimant la procédure atomistique schématisée sur la Fig. 4.1.

De ce fait, nous n'établissons pas de hiérarchie entre modèles, dans le sens où les données atomistiques n'alimentent pas directement le modèle élasto-plastique. Au lieu de cela, nous considérons les descriptions atomistiques et élasto-plastiques sur un pied d'égalité et calibrons le modèle élasto-plastique en requérant une correspon-

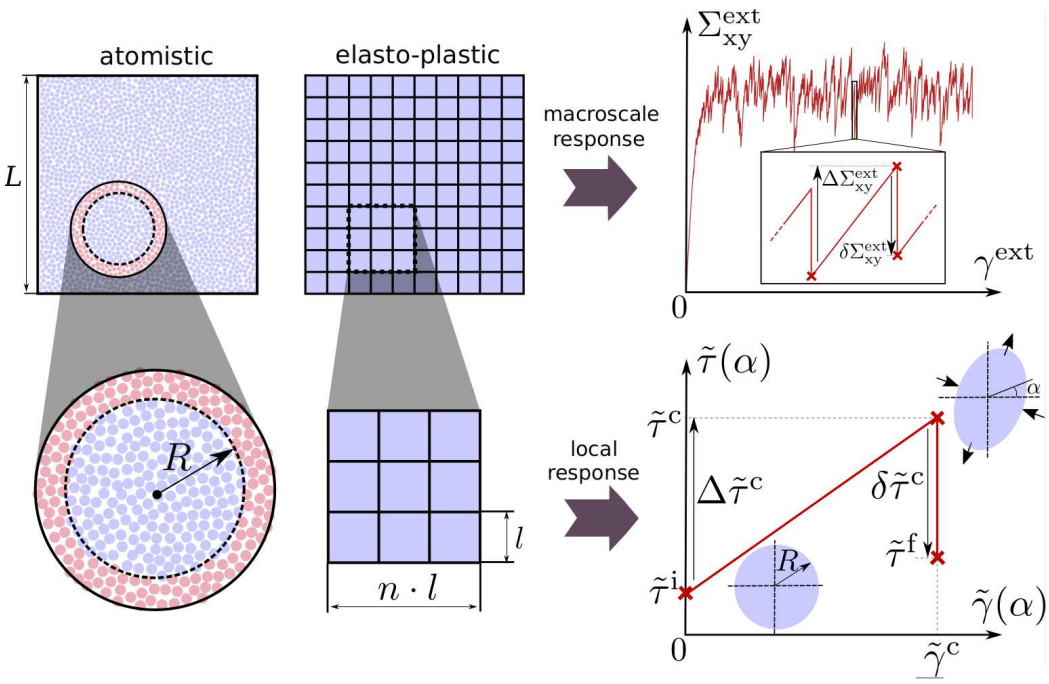

Figure 4.1 – Approche multi-échelle : les réponses mécaniques quasi-statiques macroscopiques (en haut) et locales (en bas) sont étudiées dans des modèles bidimensionnels élasto-plastiques et atomistiques. Pour mesurer les réponses locales, des inclusions de surfaces égales sont isolées du reste du système. Les notations des différentes observables sont reportées sur les courbes contrainte-déformation à droite. Des lettres capitales sont utilisées pour distinguer les grandeurs globales macroscopiques des grandeurs locales à l'échelle d'un patch en lettres minuscules avec un tilde.

dance des propriétés mécaniques entre les deux modèles lorsqu'elles sont mesurées sur la même échelle de longueur. De cette façon, il devient possible non seulement de calibrer le modèle mais également d'évaluer simultanément ses prédictions à différentes échelles.

4.1.1 Construction du modèle élasto-plastique

Le modèle élasto-plastique utilisé dans ce travail considère un milieu continu discrétisé en un réseau bidimensionnel d'éléments mésoscopiques représenté sur la Fig. 4.1. Chaque élément a une taille $l \times l$ où l est une longueur plus grande que l'échelle typique d'une ST. Les détails microscopiques en dessous de l'échelle de l'élément ne sont pas résolus. Par conséquent, les champs de contraintes et de déformations sont considérés comme homogènes au sein de chaque élément mais fluctuent dans le système.

La microstructure amorphe est représentée en considérant que chaque élément contient plusieurs systèmes de glissement locaux avec des propriétés statistiquement distribuées. Chaque système de glissement est défini par un plan de vecteur unitaire normal $\boldsymbol{n}$ et une direction de glissement $\boldsymbol{s}$, à partir desquels un tenseur de Schmid

$\boldsymbol{M} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{s} \otimes \boldsymbol{n} + \boldsymbol{n} \otimes \boldsymbol{s})$ peut être construit. Puisqu'une description bidimensionnelle est considérée, ce tenseur peut être écrit en à partir de l'angle θ entre le plan de glissement et l'axe horizontal comme

$$\boldsymbol{M}(\theta) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\sin 2\theta & \cos 2\theta \\ \cos 2\theta & \sin 2\theta \end{pmatrix} \tag{4.1}$$

avec $\theta \in (-\pi/2, \pi/2]$ dû à la symétrie. La contrainte de cisaillement résolue τ sur un plan de glissement est donnée par $\tau = \boldsymbol{M}(\theta) : \boldsymbol{\Sigma}$ où $\boldsymbol{\Sigma}$ est la contrainte sur l'élément. Chaque système de glissement possède une contrainte de cisaillement résolue critique, ou seuil de glissement, $\tau^{\mathrm{c}} > 0$. Chaque fois qu'un système de glissement remplit $\tau = \tau^{\mathrm{c}}$, il devient actif et une ST est déclenchée. Afin de rendre compte des effets de ce glissement, un incrément local de déformation libre (plastique) $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{pl}}$ est ajouté à l'élément dans lequel le réarrangement a lieu $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{pl}} = \Delta\gamma_{\mathrm{pl}}\boldsymbol{M}$ où l'amplitude $\Delta\gamma_{\mathrm{pl}}$ est statistiquement distribuée en raison de l'hétérogénéité microstructurale. La loi de distribution bornée suivante est utilisée

$$P(\Delta\gamma_{\mathrm{pl}}|\gamma_{\max}, \chi) = \frac{\chi}{\gamma_{\max}}(1 - \frac{\Delta\gamma_{\mathrm{pl}}}{\gamma_{\max}})^{\chi-1} \tag{4.2}$$

avec $\Delta\gamma_{\mathrm{pl}} \in [0, \gamma_{\max})$ où $\gamma_{\max}$ est une borne évitant une dissipation négative [Vasoya 2019]. Cette forme est choisie car elle permet de borner $\Delta\gamma_{\mathrm{pl}}$ tout en permettant d'ajuster sa forme avec un seul paramètre χ.

Les angles de glissement et les seuils sont statistiquement distribués pour représenter l'hétérogénéité structurelle. Pour s'assurer que les éléments possèdent une contrainte de cisaillement résolue critique finie pour toutes les orientations α, N systèmes de glissement, par groupes de quatre, sont introduits, avec des orientations $\theta + n\pi/4$ où $n = 1$, 2, 3 et 4. θ est uniformément distribué dans l'intervalle $(-\pi/2, \pi/2]$. Après activation, les seuils de glissement sont renouvelés indépendamment à partir de la distribution de Weibull

$$P(\tau^{\mathrm{c}}|\lambda, k) = \frac{k}{\lambda}\left(\frac{\tau^{\mathrm{c}}}{\lambda}\right)^{k-1} \exp\left[-\left(\frac{\tau^{\mathrm{c}}}{\lambda}\right)^{k}\right], \tag{4.3}$$

où le paramètre λ et l'exposant k définissent respectivement l'échelle et la forme de la distribution. Lorsqu'un élément subit un événement de glissement, les orientations et les seuils de ses N systèmes de glissement sont renouvelés à partir de leurs distributions de probabilité respectives. Ce mécanisme correspond aux changements (non résolus) des propriétés microstructurales locales induites par la déformation plastique.

Un protocole de chargement AQS est appliqué. Chaque fois qu'un ou plusieurs systèmes de glissement sont actifs, des événements de glissement sont exécutés simultanément dans tous ces systèmes. Influencés par la redistribution des contraintes, des systèmes de glissement supplémentaires peuvent devenir actifs. Le

processus d'activation est alors répété jusqu'à ce qu'aucun système de glissement ne soit actif. Au cours de ce processus, la contrainte externe est maintenue fixe. Si plusieurs systèmes de glissement au sein d'un même élément mésoscopique sont actifs simultanément, seul le système de glissement avec la plus petite distance au seuil $\Delta\tau^{\mathrm{c}} = \tau^{\mathrm{c}} - \tau$ subit un événement de glissement.

La FEM est utilisée pour calculer le champ de déplacement à chaque pas de temps, de sorte que la compatibilité, l'équilibre et les relations constitutives soient tous respectés. Un maillage structuré en quadrilatère bidimensionnel est considéré avec des fonctions de forme linéaires. La déformation totale est la somme de la déformation élastique $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{el}}$ et de la déformation plastique $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathrm{pl}}$. La contrainte est liée à la déformation élastique par la loi élastique linéaire $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{el}}$, où $\mathbb{C}$ est le tenseur de Hooke supposé ici isotrope. Des conditions aux limites bi-périodiques sont utilisées avec une déformation de cisaillement γ^{ext} appliquée le long de la direction xy.

4.1.2 Calibration du modèle élasto-plastique

Dans cette section, nous calibrons l'échelle de longueur des éléments l ainsi que les paramètres élasto-plastiques λ, k et χ associés respectivement à l'échelle des seuils, au désordre des seuils et à l'amplitude des événements de glissement. Dans un premier temps, nous concentrons notre attention sur le comportement à l'échelle macroscopique dans l'état stationnaire. Le comportement à l'échelle globale nous fournit une première compréhension générale de la dynamique du système. De plus, il introduit des contraintes dans l'espace des paramètres à ajuster et rend la calibration des propriétés locales plus aisée.

Pour calibrer quantitativement le comportement à l'échelle macroscopique, nous calculons le degré de superposition entre les densités de probabilité élasto-plastiques et atomistiques des valeurs de contraintes externes $\Sigma_{xy}^{\mathrm{ext}}$, des incréments de chargement $\Delta\Sigma_{xy}^{\mathrm{ext}}$ et de chutes de contraintes causées par les avalanches plastiques $\delta\Sigma_{xy}^{\mathrm{ext}}$ (voir Fig. 4.1). Nous définissons une fonction d'erreur $\mathcal{L}[P]$ pour chaque densité de probabilité comme

$$\mathcal{L}[P] = \left[1 - \int_{-\infty}^{+\infty} \min\{P_{\mathrm{EP}}(x),\, P_{\mathrm{MD}}(x)\}\mathrm{d}x\right], \tag{4.4}$$

où P_{EP} et P_{MD} font respectivement référence aux densités de probabilité élasto-plastique et atomistique. Lorsque les densités se superposent parfaitement, $\mathcal{L}[P] = 0$ et $\mathcal{L}[P] \to 1$ quand elles diffèrent totalement. Nous définissons l'erreur macroscopique globale comme la moyenne $\mathcal{L}_{\mathrm{macro}} = (1/3)\sum_P \mathcal{L}[P]$ des erreurs calculées pour chaque distribution.

Nous constatons que la réponse mécanique à l'échelle globale, y compris ses fluctuations, peut être reproduite quantitativement, comme indiqué sur les Fig. 4.2a et b. Cependant, nous observons que cet accord peut être obtenu pour une gamme

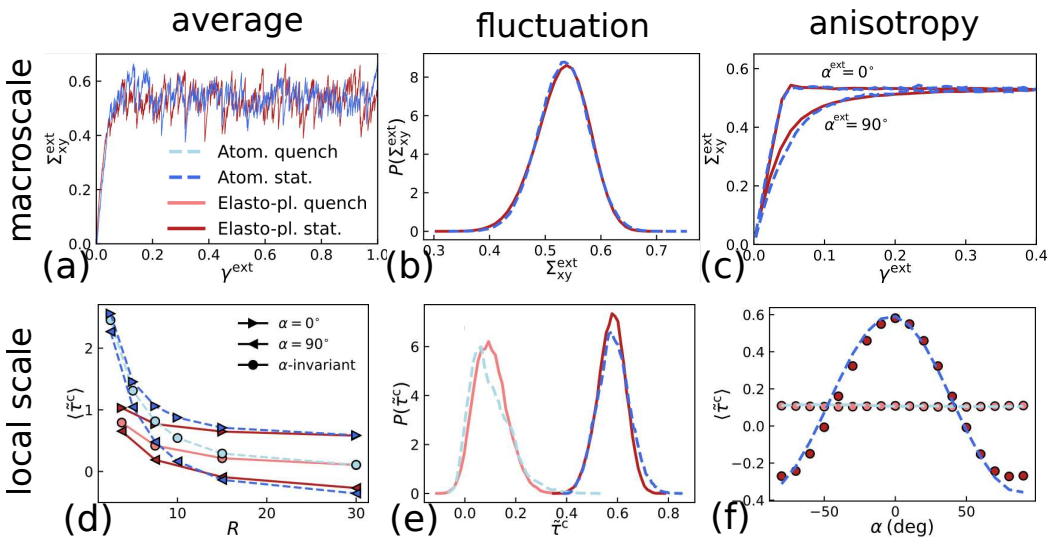

Figure 4.2 – Les réponses mécaniques quasi-statiques macroscopiques (en haut) et locales (en bas) sont étudiées dans des modèles bidimensionnels élasto-plastiques (rouge) et atomistiques (bleue). Les colonnes correspondent aux comportements moyens, à leurs fluctuations et à l'anisotropie induite obtenus pour les paramètres optimaux du modèle élasto-plastique. (a) Courbe contrainte-déformation macroscopique d'un échantillon unique. (b) Densités de probabilité des contraintes externes Σ^{ext}_{xy}. (c) Essais Bauschinger : rechargement ($\alpha = 0°$) et chargement inverse ($\alpha = 90°$) pour des systèmes préalablement déchargés depuis l'état stationnaire. (d) Limites d'élasticités τ^c moyennes en fonction de la taille du patch R_{free}. (e) Fonctions de distribution de probabilité de τ^c et (f) τ^c moyennes en fonction de l'orientation du cisaillement α pour $R_{free} = 30$.

de paramètres, ce qui ne permet pas d'établir un ensemble optimal unique de paramètres mésoscopiques. Afin de contraindre la calibration, nous nous tournons par conséquent vers les propriétés locales. Pour cela, un cisaillement local représenté dans la partie inférieure de la Fig. 4.1 est effectué pour différentes tailles de patch et différentes orientations. Une attention particulière est portée dans la direction $\alpha = 0°$ alignée avec le chargement externe et dans la direction inverse $\alpha = 90°$. Cette dernière se révèle être un élément essentiel en vue d'une calibration quantitative.

Nous définissons un ensemble de grandeurs à l'échelle mésoscopique nous permettant de comparer quantitativement différents aspects de la réponse mécanique locale des deux modèles lorsqu'ils sont mesurés à la même échelle R_{free}. Plus précisément, nous considérons la moyenne et les écarts-types de la contrainte de cisaillement locale résolue $\tilde{\tau}^{\mathrm{i}}(R_{free}, \alpha)$, de la limite d'élasticité $\tilde{\tau}^{\mathrm{c}}(R_{free}, \alpha)$, de la distance au seuil $\Delta\tilde{\tau}^{\mathrm{c}}(R_{free}, \alpha)$ et de la chute de contrainte $\delta\tilde{\tau}^{\mathrm{c}}(R_{free}, \alpha)$. En désignant génériquement les mesures élasto-plastiques par $F_{\mathrm{EP}}(R_{free}, \alpha)$ et les mesures atomistiques par $F_{\mathrm{MD}}(R_{free}, \alpha)$, nous définissons pour ces 8 grandeurs les erreurs $\mathcal{L}[F]$ comme

$$\mathcal{L}[F] = \left| 1 - \frac{F_{\mathrm{EP}}(R_{free}, \alpha)}{F_{\mathrm{MD}}(R_{free}, \alpha)} \right| . \tag{4.5}$$

Nous définissons l'erreur dans la direction vers l'avant $\alpha = 0°$ comme la moyenne $\mathcal{L}^{+}_{\mathrm{meso}} = (1/8) \sum_F \mathcal{L}[F]$. L'erreur $\mathcal{L}^{-}_{\mathrm{meso}}$ dans le sens inverse

$\alpha = 90°$ est définie de la même manière. L'erreur globale, $\mathcal{L}_{\text{stat}}$, est définie comme la moyenne entre les erreurs macroscopiques et mésocopiques comme $\mathcal{L}_{\text{stat}} = (1/2)(\mathcal{L}_{\text{macro}} + (1/2)(\mathcal{L}^{+}_{\text{meso}} + \mathcal{L}^{-}_{\text{meso}}))$. Nous optimisons $\mathcal{L}_{\text{stat}}$ en explorant le voisinage des valeurs minimisant $\mathcal{L}_{\text{macro}}$. Cette procédure nous permet d'optimiser l'ajustement des propriétés locales tout en respectant la contrainte imposée par le comportement à l'échelle globale.

Davantage d'informations sur l'origine des minima de l'erreur $\mathcal{L}_{\text{stat}}$ sont obtenues en examinant ses composantes $\mathcal{L}_{\text{macro}}$, $\mathcal{L}^{+}_{\text{meso}}$ et $\mathcal{L}^{-}_{\text{meso}}$ séparément. L'erreur $\mathcal{L}^{+}_{\text{meso}}$ des propriétés locales orientées vers l'avant présente un comportement qualitativement similaire à l'erreur macroscopique, avec une large gamme de paramètres conduisant à des valeurs quantitativement similaires, sans minimum clair. Cependant, l'erreur $\mathcal{L}^{-}_{\text{meso}}$ des propriétés mésoscopiques orientées vers l'arrière présente un minimum unique pour une combinaison spécifique de paramètres. Par conséquent, parmi les paramètres qui reproduisent les propriétés globales et locales alignées avec le chargement externe, seule une combinaison spécifique $\hat{k}$, $\hat{\lambda}$ et $\hat{\chi}$ peut simultanément reproduire le comportement local des patchs lorsqu'ils sont déchargés de l'état stationnaire.

La combinaison des paramètres optimaux estimés dans l'état stationnaire pour une échelle mésoscopique $l = 6.6$ est $\hat{k} = 2.18$, $\hat{\lambda} = 2.05$ et $\hat{\chi} = 2.25$. Elle correspond à une erreur relative globale $\mathcal{L}_{\text{stat}}$ de 16%. La figure 4.2 montre la limite d'élasticité $\tilde{\tau}^{\text{c}}$ dans les états trempés et stationnaires pour différentes échelles R_{free}. Leurs distributions de probabilité et leur dépendance à l'orientation calculées avec $R_{free} = 30$ sont présentées dans les deuxième et troisième colonnes, respectivement.

Nous obtenons un accord qualitatif dans les états trempés et stationnaires pour toutes les propriétés étudiées. Cet accord s'améliore progressivement à la fois en moyenne et en écart-type à mesure que R_{free} augmente. Pour $R_{free} = 30$, nous obtenons un accord quantitatif général. Nous observons dans l'état stationnaire une dépendance à l'orientation du cisaillement liée simplement à l'équilibre statique ($\tilde{\tau}^{\text{i}}$) mais aussi à l'anisotropie induite ($\tilde{\tau}^{\text{c}}$ et $\Delta\tilde{\tau}^{\text{c}}$). Les limites d'élasticité locales présentent une correspondance remarquablement bonne pour chaque orientation α.

Pour les paramètres optimaux du modèle, un certain nombre de propriétés non triviales et quantitativement précises émerge naturellement, sans qu'il soit nécessaire de les inclure explicitement dans le processus d'optimisation. Plus précisément, nous constatons que les relations suivantes montrent un excellent accord quantitatif avec les simulations de statique moléculaire :

— Dépendance à la taille du système des fluctuations des contraintes externes $\text{std}(\Sigma^{\text{ext}}_{xy})$ diminuant comme $\sim L^{-1}$.
— Corrélation de la contrainte externe sur les intervalles de déformation $r(\Delta\gamma^{\text{ext}}) = \left\langle \text{std}\left(\Sigma^{\text{ext}}_{xy} | \gamma^{\text{ext}}, \gamma^{\text{ext}} + \Delta\gamma^{\text{ext}}\right)\right\rangle_{\gamma^{\text{ext}}}$.

— Relation non linéaire émergente entre les seuils $\langle \tilde{\tau}^{\mathrm{c}} \rangle$ et les chutes de contraintes $\langle \delta \tilde{\tau}^{\mathrm{c}} \rangle$.

En outre, le modèle élasto-plastique reproduit de manière cohérente l'anisotropie observée dans les mesures atomistiques pour les différentes propriétés locales comme reporté dans la Fig. 4.2f. Pour mieux évaluer cette anisotropie induite, nous effectuons un test de rechargement pour différentes orientations suivant le protocole présenté dans le Chap. 3. À cette fin, les systèmes sont déchargés depuis l'état stationnaire jusqu'à une contrainte externe $\Sigma_{xy}^{\mathrm{ext}} = 0$. Lorsque les systèmes déchargés sont rechargés avec $\alpha^{\mathrm{ext}} = 0°$, nous observons une réponse presque élastique-parfaitement plastique (voir Fig. 4.2c). Cependant, lorsque le système est chargé dans le sens inverse $\alpha^{\mathrm{ext}} = 90°$, nous observons un comportement beaucoup plus mou montrant un écrouissage lent.

Si l'origine de cet effet Bauschinger a été discuté en détail dans le chapitre précédant, l'accord quantitatif obtenu ici entre simulations atomistiques et prédictions du modèle élasto-plastique est remarquable. Notons que cette anisotropie n'est pas un ingrédient intégré du modèle. Ni les lois de renouvellement du système de glissement ni l'amplitude des événements de glissement ne considèrent une orientation privilégiée. Au contraire, la réponse anisotrope émerge naturellement de la dynamique du système en présence du chargement externe en raison de l'activation statistiquement biaisée des glissements.

4.1.3 Échelle de longueur et ingrédients clés

Un résultat remarquable de la procédure de calibration réside dans l'identification d'une échelle de longueur pour les éléments mésoscopiques. La figure 4.3a montre que le $\mathcal{L}_{\mathrm{stat}}$ présente un minimum à partir duquel une longueur d'élément optimale peut être extraite dans une plage $l = 4.4 - 6.6$. Le minimum d'erreur est cependant plutôt plat et l'erreur ne commence à augmenter plus sensiblement que pour les éléments de plus grande longueur.

Afin de justifier davantage le choix de la valeur de la longueur d'élément l employée, nous prenons en compte plusieurs considérations : premièrement, le modèle perd en résolution spatiale pour des longueurs d'élément l supérieures. Deuxièmement, nous nous attendons également à ce que la représentation des STs nécessite une plus grande amplitude de déformation plastique pour une longueur d'élément inférieure. Si cet effet ne viole pas nécessairement le critère de dissipation non-négative, nous observons en revanche qu'une échelle $l \approx 5$ correspond au moment où le changement du signe de la contrainte dans le plan actif devient le comportement dominant, ce qui semble peu probable au regard de la physique attendue des STs.

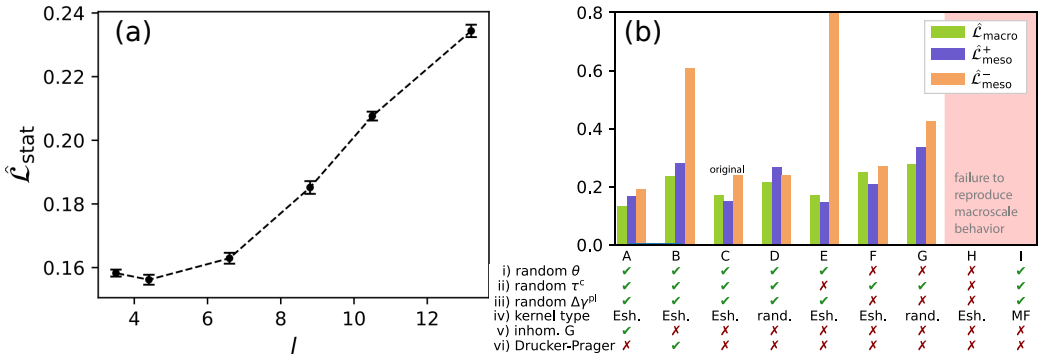

Figure 4.3 – (a) Erreurs relatives agrégées $\mathcal{L}_{\text{stat}}$ en fonction de la longueur des éléments l du modèle élasto-plastique. Les autres paramètres de calibration k, λ et χ sont optimisés. Les barres d'erreur indiquent un écart type. (b) Erreurs relatives entre les simulations atomistiques et les différentes versions du modèle élasto-plastique (A–I) calculées avec leurs paramètres optimaux respectifs pour $R_{free} = 30$ et $l = 6.6$ dans l'état stationnaire. Les erreurs sont présentées par rapport au comportement aux échelles macroscopique ($\mathcal{L}_{\text{stat}}$) et locales alignées avec le chargement externe ($\mathcal{L}^{+}_{\text{meso}}$) et dans le sens inverse ($\mathcal{L}^{-}_{\text{meso}}$).

Nous notons enfin que la gamme $l = 4.4 - 6.6$ est comparable à la limite inférieure établie dans [Tsamados 2009] concernant la validité de l'élasticité linéaire et correspond à la taille de patch optimale pour la corrélation entre l'activité plastique et $\Delta\tilde{\tau}^{c}$ [Barbot 2018]. Comme nous n'observons pas de différence significative de l'erreur à l'intérieur de cette plage de paramètre, nous considérons la borne supérieure $l = 6.6$. Cette échelle correspond vraisemblablement à la borne supérieure de la taille typique des STs et de la longueur de corrélation des processus de renouvellement structurels. Il s'agit de deux échelles de longueur fondamentales des modèles élasto-plastiques qui peuvent être ici estimées.

Malgré le succès du modèle élasto-plastique, des désaccords méritent d'être signalés. Nous constatons que le modèle élasto-plastique sous-estime systématiquement les distances au seuil dans le sens direct $\alpha = 0°$. De plus, les mesures vers l'arrière $\alpha = 90°$ sont, en général, moins satisfaisantes que vers l'avant $\alpha = 0°$. Puisque les distances au seuil et l'anisotropie avant-arrière résultent d'un phénomène auto-organisé, les écarts mentionnés suggèrent qu'un nouvel ingrédient modifiant l'évolution du système pourrait être nécessaire. Enfin, une tendance générale dans nos résultats est la déviation des simulations élasto-plastiques par rapport aux simulations atomistiques pour des petites échelles de contrainte et déformation.

Avant même de s'interroger sur les ingrédients du modèle élasto-plastique et leur la validité, d'autres sources d'erreur méritent d'être discutées. La première est la précision de la méthode atomistique des limites d'élasticité locales elle-même. Étant donné que la méthode utilise des conditions aux limites rigides, elle est susceptible de surestimer la limite d'élasticité et de sous-estimer les chutes de contrainte.

Cette observation est conforme à la sous-estimation de la limite d'élasticité locale en dessous de $R_{free} < 15$ dans le modèle élasto-plastique, et cohérent avec les travaux récents de Liu et al. [Liu 2021]. De plus, la mesure est purement locale et ne tient pas compte des hétérogénéités élastiques influençant le chargement mécanique effectif de chaque zone. Tous ces effets doivent disparaître asymptotiquement à mesure que la taille du patch augmente, ce qui est cohérent avec nos résultats.

Afin d'établir l'impact de chaque ingrédient utilisé dans le modèle élasto-plastique, nous quantifions les différentes erreurs relatives pour différentes versions du modèle. Comme indiqué dans la Fig. 4.3b, ces erreurs sont classées en trois catégories correspondant encore une fois aux propriétés à l'échelle macroscopique et aux échelles locales dans les directions avant et arrière. Les différents modèles recouvrent :

— i) : Modèle scalaire avec seulement deux systèmes de glissement d'orientations 0° et 90°.
— ii) : Seuils de glissement non évolutifs spatialement homogènes.
— iii) : Amplitudes de glissement fixes.
— iv) : Propagateur d'Eshelby, d'Eshelby redistribué aléatoirement et de champ moyen homogène.
— v) : Modules de cisaillement non évolutifs et inhomogènes.
— vi) : Sensibilité à la pression du critère de plasticité.

Nous observons que le renouvellement stochastique des seuils de glissement est la source de désordre la plus pertinente dans le système, en particulier pour reproduire l'anisotropie émergente observée dans les verres atomistiques. Le deuxième paramètre le plus pertinent réside dans les fluctuations des contraintes induites par les événements de glissement. Leurs statistiques jouent un rôle fondamental dans la réponse en régime stationnaire, mais pas nécessairement leurs corrélations spatiales. Notons cependant que les corrélations spatiales sont nécessaires pour reproduire la localisation des déformations observées en régime transitoire observé dans des verres plus stables [Barbot 2020].

Dans le même ordre d'idées, nous avons également étudié l'impact de différentes caractéristiques supplémentaires du modèle ne correspondant pas à de nouveaux ingrédients. Nous avons considéré (i) un nombre fluctuant N de système de glissement par élément élasto-plastique ; (ii) une amplitude de déformation plastique typique contrôlant les corrélations entre les seuils au cours de leur renouvellement ; (iii) une anisotropie intégrée explicite des seuils de glissement en fonction de l'orientation, comprise comme un biais dans le processus de renouvellement structurel induit par une contrainte externe. Ces ingrédients induisent des changements minimes de l'image globale présentée dans ce travail.

4.2 Extension au régime transitoire et effet du protocole de trempe

Dans cette dernière section, le modèle est étendu en introduisant une nouvelle relation constitutive qui considère explicitement la non-stationnarité dans le processus de renouvellement structurel local. Cette relation doit expliquer la réponse mécanique dépendante de l'histoire observée dans les verres atomistiques. Pour cela, nous introduisons un effet mémoire simple et physiquement motivé à l'échelle locale. Les modèles atomistiques et élasto-plastiques sont comparés dans la limite quasi-statique athermique pour une large gamme de températures parentes, ce qui permet d'établir un lien rigoureux entre les échelles.

Les verres atomistiques sont obtenus à partir de trempes instantanées de liquides à l'équilibre thermodynamique simulées par MD. Différentes températures parentes sont étudiées de $T_\mathrm{p} = 0.32$ à 0.7, allant du régime de liquide surfondu au régime de diffusion des liquides simples, respectivement. Cette plage de température est choisie de façon à chevaucher la température de couplage de mode $T_{MCT} \approx 0,373$ tout en étant capable d'atteindre l'équilibre thermodynamique avec la MD conventionnelle. Après la trempe, les verres sont relaxés puis déformés en cisaillement simple dans la direction xy suivant la méthode AQS. Nous n'étudierons ici que le régime transitoire. Les verres sont ainsi déformés jusqu'à une déformation totale de $\gamma = 0.5$.

La réponse mécanique moyenne illustrée sur la Fig. 4.4b présente une dépendance marquée de l'histoire thermique du verre. Plus la température parente est basse, plus le verre est rigide et dur. Pour les températures parentes les plus basses, le solide amorphe présente un pic de contrainte marquant le début d'un adoucissement associé à l'apparition de bandes de cisaillement. En revanche, les verres obtenus à partir d'une T_p élevée sont plus souples et présentent un comportement de durcissement progressif avec un champ de déformation plastique statistiquement homogène.

4.2.1 Développement du modèle élasto-plastique au régime transitoire

Les mesures atomiques montrent que les propriétés structurelles de l'état trempé diffèrent de celles de l'état stationnaire. Dans le modèle élasto-plastique, cette différence est introduite en considérant que les paramètres de la distribution Eq. 4.3 évoluent en fonction de la déformation plastique locale. Nous considérons une loi d'évolution linéaire pour le changement des paramètres en conséquence de la déformation plastique locale. Nous proposons ainsi pour le paramètre λ :

$$\Delta\lambda = (\partial\lambda/\partial\gamma_{pl})\Delta\gamma_\mathrm{pl} \qquad \text{and} \qquad (\partial\lambda/\partial\gamma_{pl}) = (\lambda_s - \lambda)/\gamma_\mathrm{t}, \tag{4.6}$$

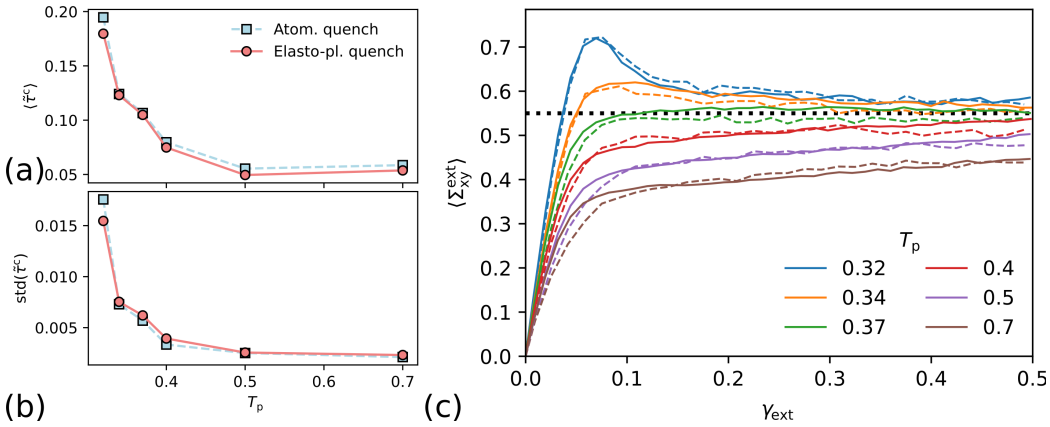

Figure 4.4 – Limite d'élasticité locale moyenne (a) et son écart type (b) dans l'état trempé en fonction de la température parente T_p calculées avec un rayon d'inclusion $R_{free} = 30$. (c) Courbes contrainte-déformation pour les modèles atomistiques (lignes pointillées) et élasto-plastiques (lignes continues) pour des verres préparés à partir de différentes températures parentes T_p. La ligne pointillée horizontale correspond à la contrainte d'écoulement stationnaire.

où λ_s est la valeur de l'état stationnaire et $\gamma_t > 0$ est une échelle de déformation plastique caractéristique. Cette loi peut être interprétée comme le terme dominant d'un développement limité d'une loi éventuellement plus complexe.

Nous considérons une approche générale dans laquelle aucune contrainte sur γ_t n'est imposée, et où les valeurs de λ sont mises à jour uniquement en fonction des changements locaux $\Delta\gamma_{pl}$ au lieu de valeurs cumulées. À cette fin, nous indexons d'abord l'histoire du système en fonction du nombre n d'événements plastiques qui se sont produits jusqu'à présent. Ainsi, la transition de n à $n+1$ est réalisée du fait d'un incrément plastique local d'amplitude $\Delta\gamma_{pl}^{(n}$. Nous intégrons l'Eq. 4.6 entre l'état courant n et l'état suivant $n+1$, et considérons les limites $\lambda \in [\lambda^{(n}, \lambda^{(n+1}]$ et $\Delta\gamma_{pl} \in [0, \Delta\gamma_{pl}^{(n}]$, ce qui donne la forme exponentielle

$$\lambda^{(n+1} = (\lambda^{(n} - \lambda_s) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta\gamma_{pl}^{(n}}{\gamma_t}\right) + \lambda_s. \tag{4.7}$$

Par souci de simplicité, une relation analogue est considérée pour le paramètre de forme k de l'Eq. 4.3, avec une valeur asymptotique k_s. Pour garder la formulation du modèle suffisamment simple, χ est supposé constant. La relation proposée implique que les événements avec une faible amplitude de déformation plastique $\Delta\gamma_{pl}$ entraînent un renouvellement des propriétés structurales statistiquement proches des précédentes. D'autre part, les événements avec une plus grande amplitude entraînent un changement comparativement plus important vers la valeur stationnaire asymptotique.

Pour implémenter des lois d'évolution récursives sous la forme de l'Eq. 4.7, les valeurs initiales $\lambda^{(1}$, $k^{(1}$, et $G^{(1}$ sont nécessaires. Ces valeurs sont données par les

valeurs des états trempés λ_q, k_q et G_q qui doivent être calibrées. D'autre part, les valeurs de l'état stationnaire λ_s, k_s et G_s sont connues à partir des résultats reportés dans la section précédente.

Afin d'induire un champ de contraintes internes semblable aux contraintes résiduelles des états trempés et imiter le processus de relaxation des liquides surfondus [Lerbinger 2021], un champ plastique de déformation propre $\boldsymbol{\varepsilon}^0_\mathrm{pl}$ est généré. Les composantes déviatoriques sont générées par élément à partir d'une distribution gaussienne de moyenne nulle et d'écart type $\mathrm{std}[\mathrm{dev}(\boldsymbol{\varepsilon}^0_\mathrm{pl})]$. L'écart type est calibré en exigeant que la contrainte de von Mises à l'échelle du patch $\tilde{\Sigma}_\mathrm{vm}$ soit statistiquement similaire aux modèles atomistiques.

La méthode des patchs locaux est ensuite appliquée pour échantillonner les valeurs de limite d'élasticité locales à l'échelle du patch $\tilde{\tau}^\mathrm{c}$. Les seuils de glissement individuels, tirés de l'Eq. 4.3, et les limite d'élasticité mesurées $\tilde{\tau}^\mathrm{c}$ sont différents en raison de l'hétérogénéité des contraintes et des effets d'échelle du patch. Les valeurs de λ_q et k_q des états trempés sont calibrées afin d'obtenir des mesures statistiquement similaires de $\tilde{\tau}^\mathrm{c}$ dans les deux modèles. Le processus est répété pour chaque température parente T_p comme indiqué dans les Fig. 4.4a et b. Pour une échelle de longueur de $R_{free} = 30$, une excellente calibration est obtenue dans les états trempés pour toutes les températures parentes. Nous obtenons également un excellent accord pour les chutes de contraintes locales à l'échelle du patch $\delta\tilde{\tau}^\mathrm{c}$ une fois les seuils de contrainte locale calibrés.

4.2.2 Réponse mécanique dans le régime transitoire

Avec l'étalonnage quantitatif des états trempés et du régime d'écoulement stationnaire, nous nous concentrons maintenant sur le régime transitoire rapporté sur les courbes contrainte-déformation de la Fig. 4.4b. L'objectif est ici de reproduire le régime d'écoulement transitoire atomistique pour toute la gamme de température parentes. Il a été proposé précédemment que le régime transitoire et ses effets mémoire soient gouvernés par l'Eq. 4.7. En principe, la valeur de γ_t devrait être intrinsèque à la dynamique du système athermique, et ne pas dépendre de la température parente ou des conditions initiales. Nous observons cependant que le paramètre γ_t, lorsqu'il est optimisé pour reproduire les résultats atomistiques, varie significativement en fonction de T_p.

Nous constatons que $\gamma_\mathrm{t} = 0.2$ reproduit presque quantitativement les verres stables obtenus à partir des températures parentes les plus basses. En particulier, le modèle décrit avec précision le pic de contrainte et l'adoucissement consécutif observé pour $T_\mathrm{p} = 0.32$. Cependant, pour des γ_t plus grands, le modèle élasto-plastique rate le pic de contrainte et présente un adoucissement beaucoup trop lent. Dans tous les cas, nos résultats confirment que le processus de renouvellement dans

les verres durs s'effectue de manière quasi-instantanée, et que les solides amorphes stables oublient localement leur état initial après les tout premiers événements plastiques.

En revanche, pour les températures parentes élevées, la convergence vers l'état d'équilibre observée dans les simulations atomistiques est beaucoup plus lente. Dans ce cas, les verres instables subissent un durcissement progressif apparenté à un recuit mécanique. Une bonne correspondance est trouvée entre les modèles atomistique et élasto-plastique pour une valeur $\gamma_\mathrm{t} \approx 2$, ce qui signifie que chaque élément doit subir de nombreux réarrangements plastiques avant d'atteindre une valeur $\langle \Sigma_{xy}^{\mathrm{ext}} \rangle$ comparable au plateau stationnaire.

Ces observations suggèrent donc une dépendance de la déformation plastique caractéristique γ_t à la température parente T_p. Cependant, puisque les systèmes évoluent en conditions athermiques, sous le même protocole de chargement, et que les compositions de tous les échantillons de verre sont identiques, les différences de dynamique doivent nécessairement être liées à des différences de propriétés structurales locales dans l'état trempé. Aussi, pour tenir compte de cette dépendance, nous généralisons le modèle de l'Eq. 4.7 en considérant une correction qui dépend de la valeur locale de λ comme

$$\gamma_\mathrm{t} = \bar{\gamma}_\mathrm{t} \left(\frac{\lambda^{(n}}{\lambda_\mathrm{s}} \right)^{\beta} . \tag{4.8}$$

Dans cette équation, les paramètres $\bar{\gamma}_\mathrm{t}$ et β sont intrinsèques à la dynamique du système athermique et ne dépendent pas de T_p ou des conditions initiales. Cela signifie que γ_t dépend maintenant de $(\lambda - \lambda_s)$ et que nous avons perdu le caractère simple de l'Eq. 4.6. Le processus d'évolution structurelle reste néanmoins local.

Pour simplifier, la même correction est utilisée pour les autres propriétés structurelles. De manière frappante, une fois $\bar{\gamma}_\mathrm{t}$ et β ajustés, ce modèle étendu permet un accord quantitatif assez précis de la réponse contrainte-déformation, mais cette fois sur toute la plage des températures parentes, comme reporté sur la Fig. 4.4b. Si nous excluons les étalonnages indépendants des états trempés et stationnaires, seuls les deux paramètres du modèle étendu $\bar{\gamma}_\mathrm{t}$ et β sont nécessaires pour atteindre cet accord pour tous les protocoles de préparation du verre.

Malgré le succès évoqué ci-dessus, quelques divergences entre les modèles élasto-plastique et atomistique doivent être soulignées. Tout d'abord, la Fig. 4.4b montre que le modèle élasto-plastique prédit des contraintes légèrement plus importantes que les simulations atomistiques dans le régime pseudo-élastique aux petites déformations pour des verres instables produits à partir de T_p élevées. Deuxièmement, les fluctuations de contrainte sont légèrement surestimées pour les verres stables. L'origine de ces deux écarts peut vraisemblablement être attribuée à la statistique des amplitudes des réarrangements plastiques 4.2, supposée invariante

pour des raisons de simplicité.

Le régime de petites déformations peut également souffrir du fait que, lors de l'étalonnage de l'état de trempé, les contraintes et les systèmes de glissement sont définis indépendamment, négligeant de fait des corrélations éventuellement plus complexes au-delà de celles introduites par l'exigence de stabilité. L'effet de cette description relativement naïve de l'état trempé est vraisemblablement plus significatif dans le cas de verres obtenus à partir de T_p élevées pour lesquelles les seuils contraintes sont plus faibles.

4.3 Conclusion du chapitre

Nous avons comparé le comportement plastique macroscopique et local d'un solide amorphe modèle basé sur deux descriptions numériques radicalement différentes. D'une part, nous avons simulé des verres à partir de simulations atomistiques. D'autre part, nous avons implémenté un modèle élasto-plastique mésoscopique basé sur une description mécanique. Ce dernier est étendu pour considérer l'anisotropie de la surface de charge via des plans faibles locaux discrets, distribués statistiquement et sur lesquels des STs peuvent être activées.

Pour réaliser une comparaison aussi quantitative que possible, nous avons considéré le cas simple d'un système bidimensionnel déformé suivant un protocole quasi-statique dans l'état d'écoulement stationnaire. Nous avons calibré le comportement macroscopique du modèle élasto-plastique et montré que la réponse mécanique à cette échelle, y compris ses fluctuations, peut être reproduite quantitativement pour une gamme de paramètres du modèle élasto-plastiques.

Grâce à la méthode des limites d'élasticité locales, nous avons également calibré la réponse mécanique locale du modèle élasto-plastique à différentes échelles. Dans ce cas, l'étalonnage montre un accord qualitatif uniquement pour un sous-ensemble optimisé de paramètres et pour des échelles de longueur suffisamment grandes. Cette calibration nous a permis d'établir une échelle de longueur pour les éléments mésoscopiques qui correspond à une borne supérieure de la taille des STs, un paramètre physique clé des modèles élasto-plastiques.

Nous constatons que certaines propriétés émergent naturellement du modèle élasto-plastique. En particulier, nous montrons que le modèle reproduit l'effet Bauschinger, à savoir l'anisotropie induite par la plasticité dans la réponse contrainte-déformation. Nous avons également discuté des succès et des échecs de notre approche et de l'impact des différents ingrédients du modèle. Ces résultats nous permettent d'envisager des directions futures de recherche pour développer des approches multi-échelles plus quantitatives.

Nous avons enfin étendu la description de la réponse mécanique du modèle élasto-plastique au régime transitoire pour une large gamme de stabilités initiales du système. La calibration du modèle reproduit les différents états trempés obtenus à partir des données atomistiques locales. Un modèle statistique d'évolution des seuils de glissement basé sur les incréments locaux de déformation plastique est proposé. Ce modèle montre un excellent accord avec les simulations atomistiques et permet de reproduire les réponses mécaniques transitoires des verres.

Nous montrons cependant que pour reproduire les réponses mécaniques des systèmes dont la préparation est différente dans un modèle unique, il est nécessaire de considérer explicitement la structure initiale dans les effets mémoire du système. Dans les verres stables, présentant un pic de contrainte suivi d'un adoucissement et de la localisation, le passage à l'état stationnaire est extrêmement rapide et se produit dès les premiers réarrangements plastiques. À l'inverse, les verres instables, trempés à partir de liquides à hautes températures, nécessitent une déformation plastique beaucoup plus importante pour converger vers l'état stationnaire.

Conclusions et perpectives

Dans ce mémoire, nous avons mis en évidence six résultats principaux concernant la déformation plastique des solides amorphes modèles étudiés numériquement :

1. Développement d'une méthode non-perturbative, directionnelle et d'ordre $\mathcal{N}$ donnant accès aux limites d'élasticité locales.
2. Développement d'une approche standard pour quantifier le pouvoir prédictif de l'activité plastique d'indicateurs structuraux.
3. Observation depuis l'échelle atomique de l'adoucissement dans les bandes de cisaillement.
4. Compréhension et modélisation de l'origine de l'effet Bauschinger.
5. Mise en évidence d'une corrélation entre duretés locales des états inhérents et fréquences des relaxations dans les liquides surfondus.
6. Développement d'une approche multi-échelle quantitative traitant du passage entre simulations atomistiques et modèles élasto-plastiques discrets.

En abordant des questions restées encore en suspens, ce travail permet d'améliorer notre compréhension des mécanismes de la déformation des matériaux amorphes. Le résultat le plus saillant est sans nul doute le développement de la méthode des limites d'élasticité permettant de sonder localement la dureté et de prédire l'activité plastique d'une structure atomique aléatoire, a priori sans particularité. Il s'agit d'un outil idéal pour documenter ce qui se passe « à l'intérieur » d'un solide amorphe et mieux caractériser la relation entre structure et plasticité. Cette approche permet en outre d'aborder le délicat problème des changements d'échelle. Grâce à cette nouvelle méthode, nous avons pu aborder des questions restées ouvertes, comme celle de la localisation ou l'origine de la polarisation induite par la déformation plastique.

Cette avancée a été le point de départ d'une large collaboration internationale regroupant les meilleurs spécialistes de l'étude numérique et théorique de la physique des matériaux vitreux. Cette étude a systématisé la méthodologie que nous avions développée précédemment afin de comparer quantitativement les pouvoirs prédictifs de l'activité plastique des différents indicateurs structuraux dans les solides désordonnés. Ce travail a été réalisé pour une large gamme de protocoles de préparation incluant des systèmes dont les temps de relaxations allaient jusqu'à des temps géologiques. Il a été montré que pour les verres ultra-stables – les plus pertinents d'un point de vue expérimental – les limites d'élasticité locales offrent une capacité de prédiction bien meilleure en comparaison de toutes les autres approches, y compris des méthodes de type machine learning.

Au-delà de l'excellence de la corrélation, la méthode des limites d'élasticité

locale fournit une mesure non-perturbative, directionnelle et sur une échelle de longueur contrôlée des seuils de réarrangements atomiques, à la base des descriptions physiques des systèmes amorphes. Pour la première fois à l'échelle atomique, il a montré que les bandes de cisaillement sont significativement plus molles que le milieu environnant avec une dureté comparable à celle d'un liquide instantanément refroidi. Cet adoucissement est rapide et se produit dans toutes les directions. À rebours de la littérature, il a été montré que les contributions des changements de volume libre sur la dureté sont négligeables par rapport aux changements induits par le rajeunissement structurel. L'accès aux seuils de déformation dans toutes les directions nous a également permis de comprendre l'origine de l'effet Bauschinger, c'est-à-dire de l'anisotropie induite par une déformation plastique. Ce dernier réside dans la polarisation des distributions des petits seuils de contrainte expliquant l'anisotropie de la réponse mécanique.

Nous avons également montré à partir de simulations atomistiques que la dynamique hétérogène des liquides surfondus est corrélée avec les résistances plastiques résiduelles locales calculées le long des directions faibles de leurs structures inhérentes. Cette corrélation augmente avec la diminution de la température et est maximale au voisinage du temps de relaxation des liquides. Pour la température la plus basse étudiée, ce maximum est comparable aux valeurs de la littérature traitant de la relation structure-propriété, mais fournit ici une image dans l'espace réel des processus de relaxation. En soulignant l'analogie entre les relaxations thermiques dans les liquides visqueux et la ST dans les solides amorphes, ces résultats apportent un nouvel éclairage sur la nature des relaxations des systèmes vitreux.

Nous nous sommes enfin appuyés sur la mesure des limites locales d'élasticité pour réaliser un changement d'échelle rigoureux entre simulations atomistiques et modèles élasto-plastiques. Il a été montré pour la première fois que la réponse mécanique à l'échelle du système, y compris ses fluctuations, peut être reproduite quantitativement. La réponse mécanique locale du modèle élasto-plastique a été calibrée pour différentes échelles de longueur. Cette calibration quantitative nous a permis d'établir une échelle de longueur correspondant à la taille des événements plastiques (un paramètre physique clé des modèles élasto-plastiques) et de reproduire naturellement des propriétés spécifiques non calibrées. L'impact des différents ingrédients du modèle a pu en outre être discuté dans la perspective de développer des stratégies de modélisation multi-échelles plus robustes.

Perspectives

Dans la continuité directe de ce travail, nous pouvons dégager des orientations de recherche qui permettraient de consolider la modélisation de la déformation des matériaux amorphes. Elles passent par le développement et la mise en oeuvre de nouvelles méthodes apparues au cours des dernières années permettant de répondre

aux questions restées ouvertes.

La première avancée réside dans la synthèse numérique de verres atomiques par la méthode SMC à partir de liquides surfondus à basse température dont les temps de relaxation sont comparables aux échelles de temps expérimentales [Ninarello 2017]. Cette avancée majeure élargit considérablement l'éventail des désordres réalisables et a permis d'étudier des systèmes atomistiques « ultra-stables » montrnant pour la première fois des bandes de cisaillement persistantes [Ozawa 2018].

Ces dernières années ont également vu la diffusion rapide des méthodes d'apprentissage automatique [Liu 2019, Hiemer 2021]. Différentes approches ont été appliquées avec succès aux solides amorphes, avec une corrélation sans précédent entre les structures et les propriétés mécaniques [Cubuk 2015, Cubuk 2017, Fan 2021, Du 2021]. Néanmoins, leur interprétation physique reste difficile du fait des nombreux paramètres mis en jeu et l'analyse reste locale, sans tenir compte des interactions élastiques à longue portée.

Couplés à de nouveaux développements de la méthode des limites d'élasticité locales, ces résultats récents constituent les bases sur lesquels s'appuieront nos futurs travaux. Jusqu'à présent, les études ont été le plus souvent menées dans des systèmes modèles uniques et se sont limitées à la plasticité. Notre direction principale de recherche consistera à systématiser ces approches à des systèmes plus réalistes, à la cavitation et à la rupture. Ce projet pourrait également fournir un outil méthodologique général d'identification offrant une base microscopique solide en vue d'une approche théorique de la mécanique des solides amorphes. Des démarches dans ce sens ont déjà produit des résultats préliminaires en généralisant par exemple la méthode des limites d'élasticité locales aux systèmes tridimensionnels [Ruan 2022]. Nous synthétisons dans la suite une liste de ces axes de développements potentiels.

Construction d'une base de données - Certaines caractéristiques de la plasticité et de la rupture des solides amorphes dépendent de manière cruciale des interactions entre particules [Wang 2015, Ferreiro-Córdova 2020, Bhaumik 2022]. Afin de généraliser nos résultats, la première tâche consistera à explorer systématiquement cet effet en construisant une base de données couvrant une large gamme de champs de force : potentiels répulsifs mous [Ninarello 2017], Lennard-Jones lissé [Barbot 2018], contacts hertziens [Hertz 1882], polymères modèles [Starr 2002], liaisons covalentes [Stillinger 1985] et potentiels à N-corps [Cheng 2009]. La philosophie consiste à mettre en œuvre des systèmes modèles pour lesquels on peut ajuster les paramètres en profitant de la forme analytique de l'interaction pour un coût de calcul relativement modeste. Une large gamme d'états vitreux pourrait être étudiée pour chaque système atomique. L'enjeu est d'obtenir des systèmes dont les températures fictives s'étalent sur une plage suffisamment large pour observer la transition fragile-ductile [Ozawa 2018, Barbot 2020]. Pour cela, nous souhaitons

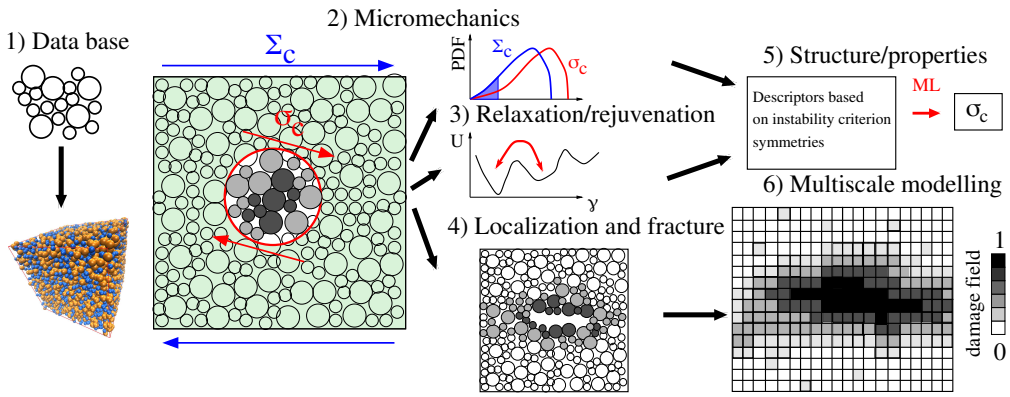

Figure 4.5 – Perspectives : (1) Construction d'une base de données. (2) Micromécanique des défauts d'écoulement étudiés avec des conditions aux limites flexibles. Les atomes de la zone verte, hors de l'inclusion centrale, sont contraints de se déformer élastiquement. Les limites d'élasticité locales σ_c et globales Σ_c correspondant aux instabilités des inclusions centrales peuvent être calculées. Les distributions de seuils sont beaucoup plus riches que les minima (queue bleue des distributions) habituellement accessibles. (3) Relaxation et rajeunissement. (4) Instabilités globales : localisation et rupture. Des conditions aux limites flexibles peuvent également être utilisées pour manipuler les épaisseurs de bande de cisaillement ou la dissipation plastique en pointe de fissure. (5) Lier les instabilités locales à la structure via un apprentissage automatique précis, efficace et interprétable. (6) Modélisation multi-échelles à partir d'un modèle élasto-plastique traitant de la cavitation et de la fissuration. Un champ de dommage égal à 1 (carrés noirs) correspond à des vides.

implémenter la méthode SMC [Ninarello 2017] et nous appuyer sur des stratégies de microalliage lorsque le SMC ne peut pas aider, par exemple pour les systèmes binaires [Parmar 2020]. Les configurations amorphes et leurs caractérisations systématiques devraient être publiées sous forme de base de données pour accélérer les découvertes, favoriser de nouvelles collaborations, assurer la reproductibilité des résultats et la transparence des méthodologies mises en oeuvre.

Micromécanique des instabilités locales - Bien qu'elle permette des résultats remarquables, la méthode de la limite d'élasticité locale souffre encore de la présence de frontières rigides dont la cinématique suit une déformation purement affine et ne considère pas la réponse élastique de la matrice environnante [Barbot 2018]. Nous proposons donc d'enrichir la méthode en appliquant des conditions aux limites flexibles à l'inclusion échantillonnée. La stratégie consisterait à pénaliser les déplacements non affines dans la matrice environnante, c'est-à-dire à éviter les instabilités tout en autorisant les déplacements affines élastiques sur des échelles de longueur contrôlables. Grâce à cette nouvelle méthode, nous souhaitons étudier le champ des surfaces de charge [Ruan 2022] en fonction de la position, de l'orientation et d'un état de contrainte initial contrôlable. Les données pourraient être ajustées à l'aide de critères de plasticité continue [Schuh 2003] pour accéder pour la première fois à une population discrétisée d'événements d'écoulement dans des matériaux amorphes. Ce projet pourrait par la suite aborder de nouveaux types d'événements d'écoulement en examinant par exemple la cavitation [Guan 2013].

Relaxation et rajeunissement - L'évolution de la population d'instabilités devrait être calculée en fonction de la déformation plastique et du protocole de préparation. Nous chercherons à comprendre comment l'état stationnaire est atteint à partir de conditions initiales hétérogènes [Fiocco 2013]. L'effet de la pression hydrostatique sur le rajeunissement plastique est particulièrement intéressant [Sun 2016]. Les questions fondamentales à aborder concerneront les mécanismes de la déformation à l'origine de la polarisation [Patinet 2020] et de la compréhension de l'énigmatique processus de rajeunissement non monotone [Ketkaew 2020].

Instabilités globales : localisation et rupture - Nous souhaitons également étendre la méthode des conditions aux limites flexibles élastiques pour simuler des bandes de cisaillement confinées, ce qui nous permettrait d'étudier leur dynamique pour différentes épaisseurs de bandes contrôlées. Ces résultats nous permettraient de comprendre leur viscosité effective, l'origine non locale de l'adoucissement mesuré en dehors de la bande [Maaß 2014], les échanges de température [Lewandowski 2006] et la dynamique d'élargissement de bande [Alix-Williams 2018]. Les conditions aux limites élastiques nous fourniront également un moyen pratique d'éliminer la plasticité en pointe de fissure et de contrôler la transition ductile-fragile [Richard 2021b]. Une configuration pertinente consisterait dans ce contexte à propager une fissure dans un solide préalablement déformé plastiquement afin de comprendre la transition entre bande de cisaillement et rupture [Greer 2013].

Lier la structure et les instabilités mécaniques grâce au machine learning - Bien que les méthodes d'apprentissage automatique supervisées impliquent différentes architectures [Cubuk 2017, Bapst 2020, Fan 2021], elles considèrent toutes des ensembles de données de nature similaire. Les différentes approches apprennent en effet de la dynamique des systèmes en ne prenant en compte que les zones les plus molles qui sont sur le point de se réarranger. De plus, ces données sont biaisées car elles ne tiennent pas compte des effets élastiques non locaux. Ces raisons expliquent pourquoi ces méthodes n'atteignent jamais asymptotiquement des scores parfaits, et ce, en dépit des milliers de paramètres ajustés. Nous proposons de tirer parti de la mesure quantitative de la limite d'élasticité locale qui sera fournie comme donnée d'entrée pour l'apprentissage supervisé. Cette approche répond aux questions posées précédemment en fournissant une mesure physique pertinente sans biais non locaux et avec laquelle il sera possible d'établir un lien robuste avec la structure. Aucune information ne sera perdue puisque nous aurons accès à toute la distribution des seuils dans une structure donnée, et pas seulement aux zones les plus molles. L'apprentissage serait donc en principe plus efficace et nécessiterait moins d'échantillons. L'interprétation du machine learning reste extrêmement difficile [Font-Clos 2022]. Pour répondre à cette question, nous proposons de partir des propriétés physiques et de développer une base de descripteurs structuraux pertinents [Behler 2011]. Les descripteurs devront gérer une représentation non invariante en rotation [Fan 2021] pour capturer la réponse anisotrope d'une

configuration locale [Barbot 2018]. Cette décomposition serait étendue aux parties isotropes [Schuh 2003], nous offrant une interprétation physique claire.

Modélisation multi-échelles - Nous souhaitons améliorer les approches élasto-plastiques développées dans le Chap. 4 en transférant les statistiques de propriétés locales calculées grâce à la méthode de la limite d'élasticité étendue par l'usage des conditions flexibles. Le modèle sera encore enrichi pour prendre en compte les hétérogénéités élastiques anisotropes du milieu [Tsamados 2009, Nicolas 2015] et leur évolution avec la plasticité [Albaret 2016]. Le deuxième axe de développement considérera explicitement la possibilité d'événements de cavitation et de discontinuité de matériau pour gérer la nucléation de fissures pour la première fois dans des modèles mésoscopiques. Tous les modèles devront être comparés à des simulations atomiques sur des tailles de système équivalentes pour garantir leur validité.
Un dernier challenge consistera à implémenter un modèle d'endommagement à gradient (ou champ de phase) couplé à la plasticité [Alessi 2015]. Nous chercherons une interprétation physique de la longueur de régularisation introduite. La stratégie consistera à décrire la non-localité comme la dépendance d'une « diffusion de contraintes locales » au taux d'événements plastiques autour de la région considérée [Bocquet 2009].

Dans le meilleur des scénarios, ces orientations conduiront à une compréhension structurelle de la mécanique des solides amorphes. Dans ce cas, la micromécanique des instabilités discrétisées nous fournirait les bases d'une théorie physique de la déformation. Bien que ces développements soient résolument consacrés à la mécanique, ils pourraient également être utiles pour comprendre des questions physiques fondamentales. La description quantitative des excitations locales est en effet un élément essentiel pour répondre à des questions ouvertes comme celles de la dynamique des liquides surfondus, de la transition vitreuse et des propriétés de transport des verres à basse température [Lerner 2021].

Dans un scénario moins optimiste, nous pourrions constater que les STs ne peuvent pas être compris de manière décisive à partir de la seule structure. Par exemple, il est envisageable que les propriétés mécaniques associées à des classes de structures locales couvrent un spectre continu et largement distribué, sans qu'il soit possible de les discrétiser. Même dans ce cas, ces travaux apporteraient de nombreux résultats en donnant accès à des statistiques de critères d'instabilité quantitatives qui, jusqu'à présent, ont toujours été ajustés a posteriori aux échelles supérieures. Cette stratégie multi-échelle ouvrirait la voie au développement de lois de comportement physiquement justifiées. À plus long terme, il s'agirait d'un point de départ solide pour une conception moins empirique de nouveaux matériaux amorphes aux propriétés contrôlées.

Nous concluons ce manuscrit en soulignant que même si la nature hors d'équilibre des solides amorphes est clairement un défi vis-à-vis de leur compréhension, il s'agit

également d'une opportunité pour découvrir de nouveaux matériaux présentant des propriétés exotiques. Mettre en oeuvre des systèmes hors d'équilibre offre en effet un nouveau degré de liberté (en plus de la composition chimique) pour designer des matériaux aux propriétés et fonctionnalités fondamentalement différentes de celles de la matière à l'équilibre.

Annexes

Annexe A

Systèmes et méthodes

Sommaire

A.1 Système **71**
A.1.1 Potentiel interatomique 71
A.1.2 Échelles de températures 72
A.2 Champs mécaniques **73**
A.2.1 Contraintes 73
A.2.2 Déformations 73

A.1 Système

A.1.1 Potentiel interatomique

La densité du système est maintenue constante et vaut $10^4/(98.8045)^2 \approx 1.02$. Des conditions aux limites périodiques sont imposées sur des boîtes carrées de dimensions linéaires $L = 98.8045$. Suivant [Shi 2005a], nous choisissons la composition de sorte que le rapport du nombre de grandes (L) et petites (S) particules soit égal à $N_L/N_S = (1+\sqrt{5})/4$. Les deux types d'atomes interagissent via des potentiels interatomiques standard Lennard-Jones $6-12$ utilisés dans [Falk 1998] avec des distances interatomiques d'énergie nulle $\sigma_{LL} = 2\sin(\pi/5)$, $\sigma_{SS} = 2\sin(\pi/10)$ et $\sigma_{LS} = 1$, et des forces de liaison $\varepsilon_{LL} = \varepsilon_{SS} = 1/2$ et $\varepsilon_{LS} = 1$.

Dans le travail présenté dans ce mémoire, ces potentiels ont été légèrement modifiés pour être des fonctions deux fois continûment différentiables. L'expression du potentiel de Lennard-Jones pour les distances interatomiques supérieures à $R_{in} = 2\sigma$ est remplacé par une fonction quartique qui s'annule à une distance de coupure $R_{cut} = 2.5\sigma$. Pour deux atomes i et j séparés par une distance r_{ij} le potentiel s'écrit :

$$U(r_{ij}) = \begin{cases} 4\varepsilon_{\alpha\beta}\left[\left(\frac{\sigma_{\alpha\beta}}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{\alpha\beta}}{r_{ij}}\right)^{6}\right] + A, & \text{for } r_{ij} < R_{in} \\ \sum_{k=0}^{4} C_k (r_{ij} - R_{in})^k, & \text{for } R_{in} < r_{ij} < R_{cut} \\ 0, & \text{for } r_{ij} > R_{cut}, \end{cases} \tag{A.1}$$

avec

$$
\begin{aligned}
A &= C_0 - 4\varepsilon_{\alpha\beta}\left[\left(\frac{\sigma_{\alpha\beta}}{R_{in}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{\alpha\beta}}{R_{in}}\right)^{6}\right] \\
C_0 &= -(R_{cut} - R_{in})(3C_1 + C_2(R_{cut} - R_{in}))/6 \\
C_1 &= 24\varepsilon_{\alpha\beta}\sigma_{\alpha\beta}^6(R_{in}^6 - 2\sigma_{\alpha\beta}^6)/R_{in}^{13} \\
C_2 &= 12\varepsilon_{\alpha\beta}\sigma_{\alpha\beta}^6(26\sigma_{\alpha\beta}^6 - 7R_{in}^6)/R_{in}^{14} \\
C_3 &= -(3C_1 + 4C_2(R_{cut} - R_{in}))/(3(R_{cut} - R_{in})^2) \\
C_4 &= (C_1 + C_2(R_{cut} - R_{in}))/(2(R_{cut} - R_{in})^3),
\end{aligned}
$$

où les indices α, β désignent les espèces en interaction, S ou L.

A.1.2 Échelles de températures

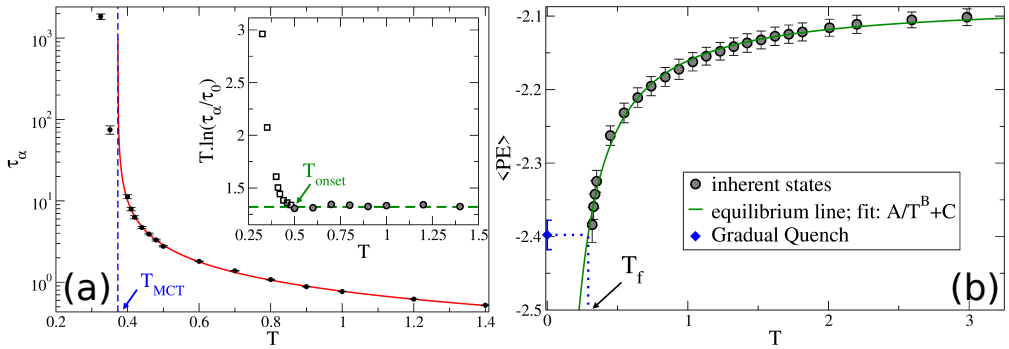

Figure A.1 – Échelles de températures : (a) Temps de relaxation τ_α en fonction de la température. La ligne rouge est un ajustement en loi de puissance pour les températures supérieures à 0.4. La ligne bleue verticale représente l'emplacement de la température de couplage de mode T_{MCT} estimée. L'encart correspond à l'énergie d'activation effective $T.ln(\tau_\alpha/\tau_0)$ constante au-dessus de la température T_{onset} et au-dessous de laquelle le système présente un comportement fragile avec une variation de τ_α non exponentielle. (b) Énergie potentielle des états inhérents par atome en fonction de la température parente des liquides équilibrés (cercles gris) et dans les systèmes trempés graduellement avec le protocole GQ (losange bleu). La ligne verte est un ajustement sur les liquides équilibrés. La température fictive T_f est estimée comme celle où l'énergie de la relation d'équilibre s'extrapole à celle du système trempé graduellement (voir les lignes pointillées bleues).

La température de couplage de mode T_{MCT} est déterminée à partir d'un ajustement fonctionnel du temps de relaxation τ_α dans le régime dynamique pour différentes températures T [Cavagna 2009]. Nous calculons d'abord la fonction $F_L(\mathbf{q}, t) = \langle \cos(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_j(t) - \mathbf{r}_j(0)))\rangle$, où l'indice L fait référence aux « grandes » particules, $\mathbf{r}_j(t)$ est la position de la particule j au moment t et $\langle \ldots \rangle$ dénote la moyenne sur j et l'origine du temps. $F_L(\mathbf{q}, t)$ est moyenné sur 100 échantillons contenant 1024 atomes chacun pour chaque température. Nous définissons le temps de relaxation τ_α comme $F_L(\mathbf{q}_{SF}, t = \tau_\alpha) = \frac{1}{e}$ avec $|\mathbf{q}_{SF}| = 6.07$ correspondant au premier pic du facteur de structure. Comme indiqué dans la Fig. A.1a, τ_α

calculé pour des températures supérieures à 0.4 est ajusté par une loi de puissance $\tau_\alpha \propto (T - T_{\mathrm{MCT}})^\gamma$. Nous obtenons $\gamma = -0.818 \pm 0.005$ et $T_{\mathrm{MCT}} = 0.373 \pm 0.001$.

Pour le protocole de trempe graduelle GQ, les échantillons sont préparés via une rampe de température lente avec une vitesse de trempe $\dot{T} = 0.32 \cdot 10^{-6}$. Cette procédure permet d'équilibrer les systèmes jusqu'à ce que le temps de relaxation alpha, soit de l'ordre de $T_g/\dot{T} \simeq 10^6$. Lorsqu'ils atteignent $T = 0.078\ T_{\mathrm{MCT}}$, les échantillons sont enfin relaxés via un algorithme de gradient conjugué pour obtenir un état mécaniquement équilibré.

La notion de température fictive T_{f} est classiquement utilisée pour faire correspondre un état vitreux hors d'équilibre à un liquide à l'équilibre. Suivant [Liu 2018a], la température fictive des verres trempés progressivement est définie à l'aide de l'énergie potentielle des états inhérents. T_{f} est définie (voir Fig. A.1b) comme la température à laquelle l'énergie potentielle de l'état inhérente du verre est égale à celle des liquides équilibrés. Pour le système GQ, nous obtenons $T_{\mathrm{f}} = 0.291 \pm 0.007$.

A.2 Champs mécaniques

A.2.1 Contraintes

La manière la plus appropriée de quantifier les flux continus comme la contrainte à partir de données atomiques reste un domaine de recherche actif [Chen 2018]. Ici, nous avons recours à l'approximation du viriel largement utilisée dans la littérature pour quantifier la contrainte dans une région d'intérêt. Dans la limite athermique [Thompson 2009], la contribution du viriel de l'atome i peut être calculée comme un tenseur

$$\mathbf{\Phi}_i = \frac{1}{2} \Sigma_{i \neq j}^{N_p} \vec{r}_{ij} \otimes \vec{f}_{ij}, \tag{A.3}$$

dans lequel l'atome j est l'un des N_p atomes dont la distance à l'atome i est inférieure au rayon de coupure du potentiel de paire . Le vecteur $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$ représente la différence des positions, et $\vec{f}_{ij}$ correspond à la force exercée sur l'atome i par l'atome j. La contrainte locale σ_{ij} peut alors être estimée en divisant la somme des contributions $\mathbf{\Phi}_i$ des atomes N_{free} dans la région locale par sa surface (son volume en 3D) comme

$$\boldsymbol{\sigma} \approx \frac{1}{\pi R_{free}^2} \Sigma_{i=1}^{N_{free}} \mathbf{\Phi}_i. \tag{A.4}$$

A.2.2 Déformations

A.2.2.1 Déformation de cisaillement globale équivalente de Hencky

Au Chap. 3, les verres sont déformés en utilisant la méthode AQS en cisaillement simple jusqu'à des déformations linéaires $\gamma_{xy} = 500\%$. La déformation globale est caractérisée dans le cadre de la théorie des déformations finies en utilisant une

description lagrangienne et en choisissant de définir la déformation à partir de la déformation logarithmique de Hencky [Neff 2014]. L'avantage de procéder de la sorte est triple : l'approximation des petites déformations n'est pas utilisée, les rotations sont éliminées et il est possible de caractériser les déformations macroscopiques et microscopiques avec des quantités comparables.

Étant donné le gradient de la transformation $\mathbf{F}$, la déformation logarithmique est $\mathbf{E} = \ln(\mathbf{U})$, où $\mathbf{U}$ est le tenseur de déformation pure droit, c'est-à-dire l'unique tenseur symétrique et défini positif tel que $\mathbf{F} = \mathbf{RU}$, avec $\mathbf{R}$ une rotation. Étant donné que le tenseur de Cauchy-Green droit $\mathbf{F}^T\mathbf{F} = \mathbf{U}^2$ est définie positif, on peut aussi écrire $\mathbf{E} = \frac{1}{2}\ln(\mathbf{U}^2)$. De plus, $\mathbf{U}^2$ peut être diagonalisé, c'est-à-dire écrit sous la forme $\mathbf{U}^2 = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{DP}$ avec $\mathbf{D}$ diagonale et $\mathbf{P}$ la matrice de changement de base associée. Enfin, les invariants de $\mathbf{E} = \mathbf{P}^{-1}\ln(\mathbf{D})\mathbf{P}$ sont ceux de $\ln(\mathbf{D})$. Pour une déformation en cisaillement simple bidimensionnelle, le tenseur gradient de la transformation est :

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 1 & \gamma \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{A.5}$$

avec γ la déformation linéaire, et le tenseur de Cauchy-Green droit

$$\mathbf{U}^2 = \begin{pmatrix} 1 & \gamma \\ \gamma & 1+\gamma^2 \end{pmatrix} \tag{A.6}$$

Ses valeurs propres sont $\lambda_\pm = \left(\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{1+\frac{\gamma^2}{4}}\right)^2$. Notant que $\lambda_+\lambda_- = 1$, puisque $\det(\mathbf{U}^2) = 1$, la racine carrée du second invariant du tenseur $\mathbf{E}$, $E \equiv \frac{1}{4}|\ln(\lambda_+/\lambda_-)| = \ln\left(\frac{\gamma}{2} + \sqrt{1+\frac{\gamma^2}{4}}\right)$. Cette quantité est appelée déformation macroscopique de Hencky.

A.2.2.2 Calcul de la déformation locale

La procédure de calcul du tenseur des déformations locales dans le système atomique est la même que celle employée dans [Barbot 2018]. Elle repose sur l'évaluation du tenseur gradient de transformation local $\mathbf{F}$ qui relie la position dans la configuration de référence (non déformée) à la configuration actuelle (déformée) via la règle de Cauchy-Born. Pour un système atomique sous déformation affine, cette transformation relie les vecteurs $\mathbf{X}^{\alpha\beta}$ et $\mathbf{x}^{\alpha\beta}$ liant les atomes α et β dans les configurations de référence et actuelle (respectivement) par :

$$x_{ij}^{\alpha\beta} = F_{ij}X_{ij}^{\alpha\beta}, \tag{A.7}$$

avec les composantes de coordonnées i et j. Étant donné que les déformations locales ne sont pas affines en général (en particulier dans les verres [Saw 2016]), la formule précédente n'est plus exacte pour chaque paire individuelle d'atomes voisins.

Comme proposé par Zimmerman *et al.* [Zimmerman 2009], nous définissons le tenseur gradient de la transformation au niveau atomique F_{ij}^{α} pour l'atome α en minimisant la fonction

$$B^{\alpha} = \sum_{\beta=1}^{n} \sum_{i=1}^{2} g(r_0^{\alpha\beta})(x_i^{\alpha\beta} - F_{ij}^{\alpha} X_j^{\alpha\beta})^2, \tag{A.8}$$

où la somme est réalisée sur les n plus proches voisins de α, et où $g(r_0^{\alpha\beta})$ est une fonction de pondération continue qui ne dépend que de la distance $r_0^{\alpha\beta}$ entre les atomes α et β dans la configuration de référence [Hinkle 2017]. Ainsi F_{ij}^{α} est le meilleur ajustement de l'Eq. (A.7), au sens des moindres carrés, pour un atome dans sa cage. Nous choisissons pour g une fonction polynomiale octique [Lemaître 2014]. La minimisation de Eq. A.8 par rapport à $\mathbf{F}^{\alpha}$ donne

$$F_{ij}^{\alpha} = \sum_{k=1}^{2} Y_{ik} Z_{jk}^{-1}, \tag{A.9}$$

avec

$$Y_{ik} = \sum_{\beta=1}^{n} (x_i^{\alpha\beta} X_k^{\alpha\beta}) g(r_0^{\alpha\beta}) \text{ et } Z_{ik} = \sum_{\beta=1}^{n} (X_i^{\alpha\beta} X_k^{\alpha\beta}) g(r_0^{\alpha\beta}). \tag{A.10}$$

Cette procédure est utilisée pour calculer le gradient de transformation pour chaque atome $\mathbf{F}$ entre des configurations macroscopiques séparées par de petits intervalles de déformation $\Delta\gamma = 0.01$. Pour les $\Delta\gamma$ plus grands, $\mathbf{F}$ est numériquement intégré en multipliant les tenseurs $\mathbf{F} = \mathbf{F}_n \mathbf{F}_{n-1} \cdots \mathbf{F}_2 \mathbf{F}_1$ où $\mathbf{F}_i$ est le tenseur du gradient de transformation entre les états i et $i+1$ séparés par $\Delta\gamma = 0.01$. La déformation locale est réduite à un scalaire en suivant la même procédure que pour la déformation globale E, ce qui implique la diagonalisation numérique de chaque $\mathbf{F}^T\mathbf{F}$. Enfin, la déformation au niveau atomique ε est définie comme le second invariant du tenseur $\frac{1}{2}\ln(\mathbf{F}^T\mathbf{F})$.

Annexe B

Projets parallèles

Ce chapitre annexe est dédié à des projets parallèles dans lesquels j'ai participé à l'interprétation théorique d'expériences réalisées sur des systèmes modèles. Je présente le cas de la mécanique d'enchevêtrements de chaînes granulaires et celui de la relation de dispersion d'un motif de Faraday à la surface d'un liquide. Le développement d'un modèle mésoscopique de plasticité cristalline innovant et sa mise en regard avec des simulations atomistiques est également discuté.

Publications associées :
• D. Dumont, M. Houze, P. Rambach, T. Salez, S. Patinet and P. Damman, *Emergent Strain Stiffening in Interlocked Granular Chains*, Phys. Rev. Lett. **120**, 088001 (2018). [COVER, PHYSICS , PRL EDITORS' SUGGESTION]
• L. Domino, M. Tarpin, S. Patinet and A. Eddi, *Faraday wave lattice as an elastic metamaterial*, Phys. Rev. E **93**, 050202(R) (2016).
• R. Baggio, S. Patinet, U. Salman and L. Truskinovsky, *An atomistically-based GL (2, Z)-Invariant Energy for Small Scale Plasticity in Crystals.*

Sommaire

B.1 Mécanique d'un ensemble de chaînes granulaires entrelacées **77**
B.2 Réseau d'ondes de Faraday vu comme un métamatériau élastique **79**
B.3 Nucléation plastique dans des cristaux : modèle mésoscopique vs approche atomistique **81**

B.1 Mécanique d'un ensemble de chaînes granulaires entrelacées

Dans la nature et l'architecture, une grande variété de structures stables sont formées à partir d'assemblages denses d'objets répartis de manière aléatoire, comme l'illustrent merveilleusement les différentes formes des nids d'oiseaux. Les agrégats peuvent être constitués de composants élémentaires avec des formes arbitrairement complexes et parfois même vivantes, comme dans le cas des fourmis de feu formant de véritables radeaux lors des inondations. La plupart des études physiques se concentrent sur des objets plus simples mais hautement anisotropes, par exemple des tiges, qui assurent un comportement collectif solide et donc la stabilité de leur assemblage même sous des contraintes de compression importantes. Il n'existe

cependant pas de contrainte stérique entre les éléments constitutifs qui pourraient entraver leur mouvement dans ces systèmes. La stabilité mécanique des agrégats de tiges est donc intimement liée à leur préparation et à la friction solide aux points de contact. D'autres travaux ont été consacrés à la mécanique des assemblages composés d'objets plus complexes, tels que les objets en forme d'étoiles ou de particules en forme de U et de Z. Dans ces systèmes, contrairement aux tiges, on considère que les contraintes stériques sont l'ingrédient clef pour expliquer l'augmentation de la rigidité observée expérimentalement. Outre l'utilisation de tiges ou d'objets non convexes rigides, il existe une troisième approche pour produire des assemblages solides à partir d'éléments qui n'interagissent pas chimiquement entre eux : mélanger de manière aléatoire des objets minces et élancés, tels que des fibres ou des chaînes granulaires. Dans ce dernier cas, un phénomène d'augmentation de la rigidité a été observé expérimentalement, en l'absence de dilution, et a été qualitativement expliqué par la formation de boucles entre les chaînes. Cependant, un mécanisme théorique quantitatif manquait encore à ce jour, et ce, en dépit du fait que la transition de blocage de ces systèmes pourrait avoir des liens fondamentaux avec la transition vitreuse des polymères.

C'est ce qui justifie nos travaux dans lesquels nous avons étudié la force nécessaire pour pénétrer dans un milieu constitué d'un enchevêtrement de chaînes granulaires de longueurs variables. Nous avons étudié la rigidité mécanique effective d'ensembles de chaînes granulaires à partir d'expériences d'indentation. Les expériences ont été menées sur de grands ensembles de chaînes granulaires monodisperses, chaque chaîne étant constituée de $\mathcal{N}$ perles d'acier connectées de 2 mm de diamètre, avec $2 \leq \mathcal{N} \leq 50$ (voir Fig.B.1a). L'empilement aléatoire de l'ensemble a été obtenu en faisant vibrer le système à forte amplitude, jusqu'à ce qu'une densité stationnaire ait été atteinte. La force nécessaire pour faire pénétrer un indenteur cylindrique dans l'assemblage a été mesurée en fonction de la profondeur d'indentation.

Nos observations montrent une croissance exponentielle de la force de pénétration en fonction de deux facteurs : la profondeur d'indentation et la racine carrée du nombre de perles par chaîne (voir Fig.B.1b). Le premier facteur rappelle l'auto-amplification du frottement, comme dans les cas d'un cabestan ou de celui d'ensembles intercalés de feuilles, où l'augmentation de la résistance au déplacement est créée, et proportionnelle, à la force exercée par l'opérateur. Le deuxième facteur souligne le rôle central joué par les contraintes topologiques, de manière similaire à la physique des polymères. Nous avons proposé par conséquent un nouveau modèle de blocage basé sur ces deux ingrédients, et le confrontons aux données expérimentales. Nous trouvons un très bon accord entre modèle et expériences, y compris pour une situation étendue dans laquelle les chaînes sont diluées dans un milieu environnant de perles non reliées entre elle.

Il est intéressant de noter que ce système présente un nouvel exposant d'auto-amplification (1/2 en longueur de chaîne) par rapport au cabestan (1 en angle)

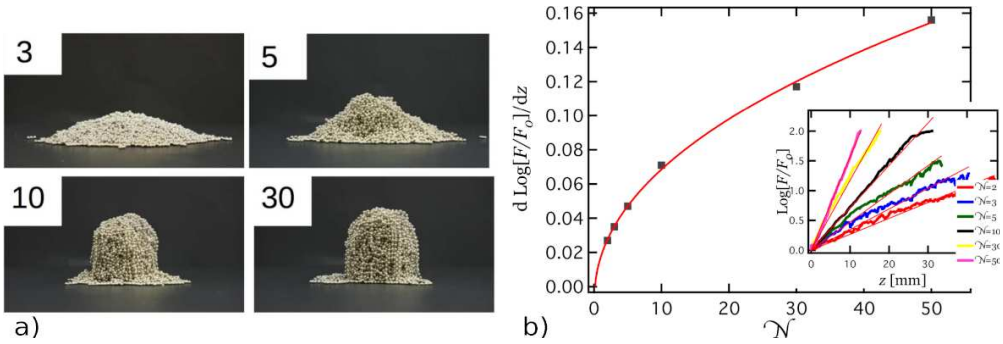

Figure B.1 – (a) Photographies montrant les états finaux d'ensembles de chaînes granulaires denses ($\Phi = 1$) après le retrait de leur récipient cylindrique pour différents nombres $\mathcal{N}$ de perles par chaîne. (b) Exposants de la relation force d'indentation-profondeur d'indentation z en fonction du nombre de perles par chaîne. La ligne solide indique est un ajustement en loi de puissance, donnant $\sim \mathcal{N}^{0.46}$. Encart : représentation log-lin de la force d'indentation en fonction de la profondeur d'indentation. Les lignes droites solides indiquent des ajustements linéaires dont les pentes sont les valeurs du graphique principal.

et au livre entrelacé (2 en nombre de pages). Il convient toutefois de mentionner que même si le modèle fonctionne bien, il suppose implicitement des chaînes suffisamment longues pour obtenir des statistiques de conformation appropriées. Bien que nous soyons confiants dans l'explication proposée pour les chaînes suffisamment longues, un autre mécanisme pourrait également expliquer le comportement mécanique observé pour les agrégats de chaînes plus petites. Au-delà de la similitude avec la transition vitreuse des polymères, ce système permet d'étudier le frottement dans des assemblages complexes, avec des implications pratiques pour la conception de nouveaux matériaux, de l'industrie textile à la biologie.

B.2 Réseau d'ondes de Faraday vu comme un métamatériau élastique

Un matériau artificiel, constitué de blocs élémentaires organisés, est appelé métamatériau lorsqu'il présente des propriétés qui diffèrent largement de celles de la cellule unitaire. Ces nouvelles propriétés physiques sont intrinsèquement liées à la présence d'une structure sous-jacente. Bien que le terme métamatériau soit encore fortement associé aux matériaux d'indice négatif en optique, il se réfère également aux propriétés mécaniques des structures, à l'acoustique, voire à la thermodynamique. En contrôlant l'agencement de ces blocs, de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique, plusieurs nouvelles propriétés mécaniques apparaissent dans les métamatériaux, tels que les effets de camouflage dans les plaques élastiques, l'auxétisme ou le contrôle des ondes sismiques. Jusqu'à présent, le principal défi a été de concevoir des cellules unitaires appropriées pour obtenir des métamatériaux efficaces. Dans ce travail, nous avons proposé une approche qui utilise les ondes stationnaires d'un milieu comme structure sous-jacente d'un

métamatériau macroscopique. L'originalité de cette étude est ici d'utiliser une structure dynamique, l'instabilité de Faraday à la surface d'un fluide, générée spontanément pour comprendre les propriétés effectives du milieu.

L'instabilité de Faraday est souvent utilisée comme un système modèle de la physique non linéaire. Cette instabilité hydrodynamique apparaît à l'interface entre deux fluides soumis à une oscillation verticale. Au-dessus d'un certain seuil d'accélération, la surface montre une déformation stationnaire qui oscille à la moitié de la fréquence d'excitation. Un exemple de motif d'ondes de Faraday est reporté sur la Fig. B.2a. Ce motif est à la fois stable dans le temps et régulier dans l'espace, avec une longueur d'onde Faraday définie par la relation de dispersion des ondes gravito-capillaires. Pour des conditions expérimentales spécifiques, on peut former des motifs bien structurés et stables (carrés, hexagones, triangles...). Bien que le choix du motif de cette instabilité soit assez complexe, pour un récipient carré, un motif carré est le plus souvent obtenu, ses deux directions principales étant alignées avec les côtés du conteneur. Ce motif devient instable en augmentant l'amplitude du forçage et conduit à un état chaotique de la surface du fluide. Pour l'instabilité de Faraday, le mécanisme de transition vers le chaos a été étudié, et il a été montré que la transition entre ces phases passe par un régime oscillant présentant des ondes transversales.

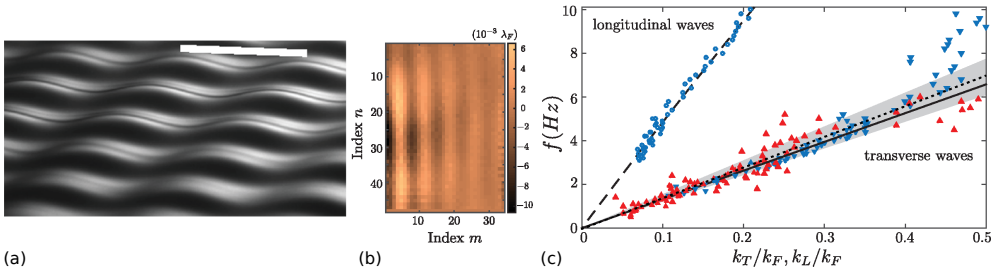

Figure B.2 – (a) Vue latérale du motif d'onde (instabilité de Faraday) obtenu en faisant vibrer verticalement un liquide. La barre blanche correspond à la longueur d'onde du réseau ($\sim$ 5 mm). Nous étudions les oscillations latérales de ce motif. (b) Carte de la partie réelle du déplacement horizontal. Le dispositif de forçage est sur la gauche ; chaque pixel représente un sommet (ou un creux) du motif de Faraday. (c) relation de dispersion correspondante. Triangles bleus : ondes transversales dans la direction y. Triangles rouges : ondes transversales dans la direction x. Cercles bleus : ondes longitudinales dans la direction y. Ligne tiretée : relation de dispersion des ondes gravito-capillaires. Ligne noire solide : ajustement linéaire. Ligne pointillée et fond gris : notre prédiction théorique et son incertitude associée.

Dans ce travail, nous avons caractérisé cette instabilité secondaire qui survient dans les motifs de Faraday lorsqu'on s'approche de la transition vers le chaos. Cette instabilité entraîne des vibrations du motif de Faraday similaires à une onde élastique transversale bi-dimensionnelle. Grâce à un système de forçage adéquat, il a été possible d'explorer la réponse de ces ondes sur une large gamme de fréquences. Nous avons alors pu établir la relation de dispersion pour ces ondes et nous avons montré

qu'elle diffère nettement des ondes gravito-capillaires standards qui se propagent à l'interface liquide-air. Nous proposons un mécanisme physique qui combine la tension de surface avec la structure d'onde de Faraday préexistante à l'interface. L'origine d'une « force de rappel » est comprise à partir de la variation de la surface du fluide induite par l'onde et l'énergie qui lui est associée via la tension de surface. Cette approche nous permet de dériver un module de cisaillement effectif pour le motif d'onde de Faraday qui reproduit de manière quantitative les observations expérimentales, sans paramètre ajustable (voir Fig. B.2c).

B.3 Nucléation plastique dans des cristaux : modèle mésoscopique vs approche atomistique

Dans le cadre de la thèse de R. Baggio, j'ai participé à la validation d'un modèle mésoscopique de plasticité cristalline innovant, permettant l'étude de la nucléation et de l'évolution de la plasticité pour les réseaux cristallins 2D. Il s'agit d'un phénomène complexe dans lequel le rôle déterminant est porté par les dislocations : des défauts du réseau cristallin qui facilitent le glissement relatif entre les plans du réseau et permettent ainsi la propagation de déformations permanentes. Le phénomène est rendu extrêmement complexe par le fait que les dislocations peuvent interagir entre elles de plusieurs manières mais également avec d'autres défauts qui caractérisent le réseau cristallin. Cet état de fait rend difficile la formulation de modèles capables de décrire le phénomène de manière précise et exhaustive. D'autre part, même avec les puissances de calcul actuelles, la description de ce phénomène à une échelle mésoscopique pertinente est prohibitive à partir de simulations atomistiques.

L'approche mésoscopique innovante développée par mes collaborateurs consiste ici à la mise en œuvre d'une fonction de densité d'énergie prenant en compte la symétrie des matériaux cristallins. La méthodologie développée n'est plus limitée aux opérations orthogonales telles que l'invariance du réseau par rotation et réflexion, mais inclut également d'autres transformations non orthogonales, comme les cisaillements invariants. La mise en oeuvre de ce potentiel a pour effet d'obtenir un paysage énergétique contenant un nombre infini de puits de potentiel caractérisé par un comportement périodique le long des directions de déformations en cisaillement. Ce comportement périodique est défini de manière tensorielle pour les déformations finies génériques. C'est donc un paysage beaucoup plus riche que celui utilisé par d'autres modèles dans lesquels une énergie périodique n'est associée que dans des directions prédéterminées en termes de cinématique, et formulée en termes de petites déformations.

Afin de valider le modèle sur un système réaliste, nous avons comparé quantitativement les prédictions de ce modèle mésoscopique à une approche atomistique. La densité d'énergie invariante est développée directement à partir d'un potentiel interatomique de type Lennard-Jones en supposant que l'hypothèse de Cauchy

Born est valide. La densité d'énergie est introduite dans une formulation continue et hyperélastique pour la symétrie hexagonale. L'énergie prend automatiquement en compte la présence de directions à faible coût énergétique le long des plans cristallographiques. De plus, elle représente pleinement l'asymétrie d'énergie qui caractérise les directions génériques du cisaillement. Le domaine est divisé en une série d'éléments réguliers. Chacun de ces éléments représente un ensemble d'atomes de sorte que le paysage énergétique qui leur est associé est périodique.

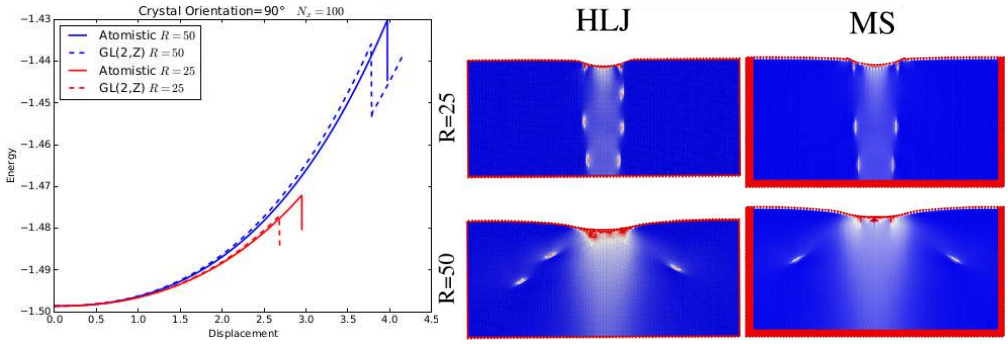

Figure B.3 – Nano-indentation quasi-statique d'un cristal bidimensionnel pour deux rayons de nano-indenteurs différents. Gauche : Énergie en fonction du déplacement jusqu'à la nucléation. Droite : Configurations correspondantes de dislocations après nucléation simulées à partir du modèle mésoscopique (HLJ) et de statique moléculaire (MS).

Le modèle est utilisé pour étudier la nucléation homogène de dislocations dans un cristal parfait. Des orientations cristallines différentes sont analysées ainsi que différents trajets de chargement. En particulier, différents cisaillements simples sont considérées en plus des cisaillements purs. Du fait de la fonctionnelle d'énergie utilisée, certains types de défauts apparaissent naturellement après nucléation, tels que les vides et les microfractures. Ces résultats sont mis en regard avec des simulations atomistiques et montrent un bon accord avec des dernières. Néanmoins, même quand sa discrétisation implique une échelle de longueur comparable à celle du paramètre de maille, le modèle mésoscopique ne peut être considéré comme une approche équivalente aux simulations atomistiques. En effet, l'invariance supposée dans le modèle implique qu'un certain nombre d'atomes se déforment de manière homogène autour du point de grille considéré.

Des résultats des simulations de nano-indentation ont par la suite été réalisées. Ici aussi, nous observons un accord remarquable entre les deux approches en termes de charge critique et de type de nucléation, comme reporté sur la Fig. B.3. Cependant, le modèle mésoscopique présente certaines limites dans la représentation de l'évolution des microstructures qui, soumises à la contrainte de compatibilité (implicite dans la formulation continue), s'avèrent parfois trop rigides.

Annexe C

Curriculum vitae

Informations personnelles

Nom, Prenom :	Patinet, Sylvain
Identifiants :	ORCID 0000-0002-1585-8275, Research ID P-3492-2016
Date de naissance :	25/02/1983
Nationalité :	Française
Site internet :	https://blog.espci.fr/spatinet/
Google Scholar :	https://scholar.google.fr/citations?user=V09UJDgAAAAJ&hl=fr

Thèmes de recherche

- Plasticité des alliages cristallins et des verres.
- Théorie de l'élasticité/Défauts à longue portée.
- Transition de dépiégeage critique.
- Propagation de fronts de fissure dans des milieux aléatoires.

Diplômes

• **2006-09** : *Thèse de doctorat en physique du solide*, Université Paris-SUD, France. *«Étude à l'échelle atomique du durcissement par solution solide dans les alliages binaires cubiques à faces centrées»*. Service de Recherche en Métallurgie Physique, Commissariat à l'énergie atomique (CEA), Saclay, France.
• **2006-07** : *Master en physique du solide*, Institut National des Sciences et Techniques Nucléaires (INSTN), Saclay, France.
• **2001-05** : *Ingénieur en génie mécanique*, Université de Technologie de Compiègne (UTC), France.

Expérience professionnelle

• **Depuis 2013** : *chercheur CNRS* au laboratoire PMMH (Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes), UMR 7636 - CNRS et ESPCI (École Supérieure de Physique et Chimie de la Ville de Paris), Paris, France. Classé 3ème par la section 9 du comité national sur 100 candidats.
• **2012-13** : *Postdoctorat* Dep. of Materials Science and Engineering, Johns Hopkins University, Baltimore, États-Unis. *"Atomic-scale flow defect in metallic glasses"*.
• **2010-12** : *Postdoctorat* au laboratoire PMMH, UMR 7636 - CNRS à l'ESPCI, France. *"Crack front propagation in heterogeneous brittle materials"*.

Prix scientifiques

- 2010 : Prix Jacques Dalla Torre attribué par la Société Française de Métallurgie et de Matériaux.

Production scientifique

- 28 articles publiés dans des revues à comité de lecture de premier plan (dont : 4 dans Phys. Rev. Lett., 1 dans PNAS, 2 dans J. Mech. Phys. Solids et 1 dans les Comptes Rendus de l'Académie des Sciences), dont 2/3 en tant que premier auteur ou responsable du projet.

Projets de recherche financés

- 2022-26 : ANR, projet MESOCRYSP : *"Mesoscopic Model Informs Engineering Crystal Plasticity"* (PI : L. Truskinovsky).
- 2021-22 : INSIS PEPS, Mechanics of the future call, projet MARIONETTE : *"Materials for electronics 'more-than-Moore'"* (PI : F. Amiot).
- 2020-21 : Labex LaSIPS, projet MuMoPlAS : *"Multiscale Modeling of Plasticity in Amorphous Solids"*.
- 2016–20 : ANR JCJC, projet PAMPAS : *"Physical and Atomistic-based Modelling of Plasticity in Amorphous Solids"*.
- 2015-19 : ANR, projet RELFI : *"From Local Rearrangements to Internal Friction"* (PI : J. Crassous).

Expertises

- 2016 : Membre du jury de la thèse G. Marnier, INSA Rouen, France.
- 2020 : Commission de recrutement pour un poste de maître de conférences à l'Institut Jean le Rond d'Alembert, Université Pierre et Marie Curie.
- Expert pour les journaux scientifiques (voir mon profil complet : `https://www.webofscience.com/wos/author/record/455909`) : Acta Materialia, Applied physics letters, Computational Materials Science, Europhysics Letters, Journal of Non-Crystalline Solids, Journal of Physics : Materials, Metals, Nature Communications, Nature Physics, Philosophical Magazine, Philosophical Magazine Letters, Physical Review E, Physical Review Letters, Physical Review Materials, Physical Review Research, SciPost, Soft Matter, Technical Physics.
- Expert pour les agences nationales de financement : Office of Basic Energy Sciences (USA) et ANR (France).

Responsabilités nationales

- 2016-2021 : Membre élu au Comité National de la Recherche Scientifique de la section 9 : « Mécanique du solide. Matériaux et structure. Biomécanique. Acoustique » ($\sim$ 2 mois/an). Ce comité joue un rôle central dans le dispositif de recherche français. Ses membres aident à la définition de la politique scientifique du CNRS

et analysent la conjoncture actuelle. Le comité participe au recrutement des chercheurs, promeut leur carrière et suit l'activité des laboratoires.
- 2016 : Membre du comité de visite du Haut Conseil de l'Évaluation de la Recherche et de l'Enseignement Supérieur (HCERES) pour l'évaluation du laboratoire Pprime (UPR 3346), Poitiers.

Responsabilités au laboratoire et à l'ESPCI

- Depuis 2021 : Membre élu du comité de pilotage pour le développement durable à l'ESPCI.
- Depuis 2020 : Référent développement durable au PMMH. Membre du collectif Labos 1point5 (https://labos1point5.org/) pour mieux comprendre et réduire l'impact environnemental de la recherche.
- Depuis 2016 : Responsable communication du laboratoire PMMH pour l'Institut des Sciences de l'Ingénierie et des Systèmes du CNRS (INSIS).
- Depuis 2015 : Organisateur des séminaires du laboratoire : organisation, invitation et accueil des chercheurs invités (35/an).
- Depuis 2013 : Correspondant informatique de l'ESPCI pour le laboratoire PMMH.
- Depuis 2013 : Responsable du calcul haute performance du laboratoire PMMH : Étude de marché, achat, développement et administration des clusters de calcul.
- Depuis 2013 : Responsable du site internet du laboratoire PMMH (https://www.pmmh.espci.fr/) : Refonte et administration.

Activités d'enseignement et de vulgarisation

- Depuis 2018 : Enseignant pour les étudiants de Master 1 à Sorbonne Université : Résolution par éléments finis et calculs de structure (37h/an).
- 2021 : Enseignant pour les étudiants de Master 2, Tendances actuelles en sciences des matériaux, École Polytechnique (2h).
- 2013-17 : Animation : Fête de la Science à l'ESPCI visant à informer le public, notamment les groupes scolaires issus des écoles primaires et secondaires, sur les évolutions des sciences et leurs implications pour la société.
- 2013-17 : Jury de stage, licence "PhyTem" de l'ENS Cachan (2 demi-journées/an).
- 2012-13 : Enseignant pour les étudiants de premier cycle à l'Université Johns Hopkins : Thermodynamique, structures et simulations (40h/an).
- 2012-13 : Participation au programme de recherche en éducation de l'Université Johns Hopkins : Entretiens avec des étudiants résolvant des exercices individuels (18h).
- 2010 : Enseignant à la Faculté Biomédicale des Saints-Pères Paris Descartes : Première Année d'Études de Santé. Bases physiques du transport et de l'équilibre (24h).
- 2007-08 : Enseignant à l'Institut National des Sciences et Techniques Nucléaires (INSTN). Cours du Master 2 de physique du solide (30h/an).

Encadrements

Étudiants postdoctoraux : - 2017-18 A. Hernandez-Garcia, -2018-21 D. Fernandez-Castellanos
Étudiants en thèse : - 2019(-22) D. Kumar - 2017-21 A. Barbot, - 2017-21 M. Lerbinger, - 2013-16 B. Tyukodi
Étudiants en Master (période de 3 à 6 mois en moyenne) : - 2021 P. Tanure (ENSTA), - 2020 H. Padovani (UTC), - 2019 T. Labarre (UPMC), - 2019 M. Ziapkoff (UTC), - 2019 J. Decayeux (UTC), - 2018 C. Cadet (Mines ParisTech), - 2017 A. Barbot (ENS), - 2017 M. Lerbinger (UPMC), - 2016 C. Julien (UPMC), - 2016 H. Wang (ESPCI), - 2016 P. Soudon (UPMC), - 2016 P. Le Jeannic (UPMC), - 2014 C. Ricard (UTC), - 2012 G. Vallat (UTC) - 2008 J. Tchoufag (UTC).

Présentations lors de conférences et d'ateliers internationaux

- Lorentz Center, Leiden, Netherlands, 2022 (oral invité)
- CECAM Understanding plastic deformation via AI, Lugano, 2022 (oral invité)
- CECAM Recent advances on the glass problem, Lausanne, 2022 (oral invité)
- GDR ModMat HEAs Workshop, Thiais, 2021 (oral invité)
- Workshop on Disordered Elastic Systems, Spetses, Greece, Sep. 2021 (oral invité)
- Glassy Systems and Inter-Disciplinary Applications, Cargèse, 2021 (oral invité)
- Liquid Matter Conferences, Prague, Czech Republic, 2021 (poster)
- CECAM Glass & Jamming, Lausanne, Switzerland, 2021 (poster)
- UCGP7, Bristol, UK, 2018 (oral) - ESMC, Bologna, Italy, 2018 (2 oraux)
- StatPhys26, Lyon, France, 2016 (oral) - APS, Baltimore, USA, 2013 (oral)
- IWCMM, Baltimore, USA, 2012 (oral) - Les Houches, France, 2012 (poster)
- MRS, Boston, USA, 2012 (oral) - EuroMat, Montpellier, France, 2011 (oral)
- EuroMat, Montpellier, 2011 (oral) -CFM, Besançon, France, 2011 (2 oraux)
- CECAM, Dublin, Ireland, 2011. (poster) - JMC12, Troyes, France, 2010 (2 oraux)
- Plasticité, Marseille, France, 2009 (oral) - SPF, Palaiseau, France, 2009 (poster)
- MMM, Tallahassee, USA, 2008 (oral) - Dislocation, Hong Kong, 2008 (poster)

Séminaires invités

- LiPhy, Grenoble, France (2022)
- DAMTP, Cambridge, England (2021)
- FEMTO, Besançon, France (2020)
- CINam, Marseille, France (2019)
- L2C, Montpellier, France (2018)
- IPR, Soft Matter Dep., Rennes (2017)
- ENS, Département de Chimie, Paris (2016)
- PMMH, ESPCI, Paris, France (2014)
- FAST, Université Paris Sud, Orsay (2012)
- CrisMat, ENSI, Caen, France (2012)
- PMMH, ESPCI, Paris, France (2011)
- Institut Pprime, Poitiers, France (2010)
- GLVT-CNRS, Thiais, France (2010)
- UMET, Univ. de Lille, Lille, France (2009)
- SPCSI, CEA, Saclay, France (2009)
- LEM, ONERA, Châtillon, France (2009)
- Roberval laboratory, UTC (2008)

Collaborations internationales (avec publications conjointes)

- Cheng, Yongqiang (Oak Ridge, ORNL, USA)
- Ding, Jun (Xi'an, XJTU, China)
- Guan, Pengfei (Beijing, CSRC, China)
- Lerner, Edan (Amsterdam, Netherlands)
- Ma, Evan (Baltimore, JHU, USA)
- Manning, M. Lisa (Syracuse, USA)
- Sastry, Srikanth (Bengaluru, JNCASR, India)
- Damman, Pascal (Mons, Belgium)
- Falk, Michael L. (Baltimore, JHU, USA)
- Hansen, Alex (Trondheim, NTNU, Norway)
- Liu, Andrea J. (Philadelphia, Uppen, USA)
- Magana, Alejandra J. (Purdue Univ., USA)
- Reese, Michael J. (Baltimore, JHU, USA)
- Vieira, Camilo (Barranquilla, Colombia)

Collaborations nationales (avec publications conjointes)

- Barrat, Jean Louis (LiPhy, Grenoble)
- Berthier, Ludovic (L2C, Montpellier)
- Dalmas, Davy (LTDS, Lyon)
- Lemaître, Anaël (Navier, Ch. s/ Marne)
- Proville, Laurent (SRMP, Saclay)
- Salez, Thomas (LOMA, Talence)
- Barthel, Étienne (SIMM, Paris)
- Bonamy, Daniel (IRAMIS, Saclay)
- Eddi, Antonin (PMMH, Paris)
- Martens, Kirsten (LiPhy, Grenoble)
- Roux Stéphane (LMT, Gif sur Yvette)
- Vandembroucq, Damien (PMMH, Paris)

Annexe D

Liste des publications

En préparation

S. Patinet, J. Tchoufag and L. Proville, *Thermal activation of the crossing of a solute atom by a dislocation.*
R. Baggio, S. Patinet, U. Salman and L. Truskinovsky, *An atomistically-based GL (2, Z)-Invariant Energy for Small Scale Plasticity in Crystals.*

Articles de revues scientifiques à comité de lecture

- 2022

[Tyukodi 2022] B. Tyukodi, A. Barbot, R. Garciá-Garciá, M. Lerbinger, S. Patinet and D. Vandembroucq, *Coarse-graining amorphous plasticity : impact of rejuvenation and disorder*, arXiv :2208.14366.

[Xiang 2022] X. Xiang, S. Patinet, S. Volz and Y. Zhou, *Low-frequency Quasilocalized Vibrational Modes as Efficient Heat Carriers in Glasses*, arXiv :2206.05402 (soumis à Phys. Rev. Lett.).

[Kumar 2022] D. Kumar, S. Patinet, C. E. Maloney, I. Regev, D. Vandembroucq and M. Mungan, *Mapping out the glassy landscape of a mesoscopic elastoplastic model*, arXiv :2206.02683 (soumis à J. Chem. Phys.).

[Castellanos 2022] D. Fernández Castellanos, S. Roux and S. Patinet, *History dependent plasticity of glass : a mapping between atomistic and elasto-plastic models* (soumis à Acta Mater.).

[Lerbinger 2021] M. Lerbinger, A. Barbot, D. Vandembroucq and S. Patinet, *On the relevance of shear transformations in the relaxation of supercooled liquids*, arXiv preprint arXiv :2109.12639 (soumis à Phys. Rev. Lett.).

[Ruan 2022] D. Ruan, S. Patinet, and M. L. Falk, *Predicting plastic events and quantifying the local yield surface in 3D model glasses*, J. Mech. Phys. Solids **158**, 104671 (2022).

- 2021

[Fernández Castellanos 2021] D. Fernández Castellanos, S. Roux, S. Patinet, *Insights from the quantitative calibration of an elasto-plastic model from a Lennard-Jones atomic glass*, Comptes Rendus Physique de l'académie des sciences, Special Issue :Plasticity and Solid State Physics **22** (S3), 1 (2021).

[Xu 2021] B. Xu, M.-L. Falk, S. Patinet, P. Guan, *Atomic nonaffinity as a predictor of plasticity in amorphous solids*, Phys. Rev. Mater. **5**, 025603 (2021).

- 2020

[Richard 2020] D. Richard, M. Ozawa, S. Patinet, E. Stanifer, B. Shang, S. A. Ridout, B. Xu, G. Zhang, P. K. Morse, J.-L. Barrat, L. Berthier, M. L. Falk, P. Guan, A. J. Liu, K. Martens, S. Sastry, D. Vandembroucq, E. Lerner, M. L. Manning, *Predicting plasticity in disordered solids from structural indicators*, Phys. Rev. Mater. **4**, 113609 (2020).

[Patinet 2020] S. Patinet, A. Barbot, M. Lerbinger, D. Vandembroucq, A. Lemaître, *On the Origin of the Bauschinger Effect in Amorphous Solids*, Phys. Rev. Lett. **124**, 205503 (2020).

[Barbot 2020] A. Barbot, M. Lerbinger, A. Lemaître, D. Vandembroucq, S. Patinet, *Rejuvenation and Shear-Banding in model amorphous solids*, Phys. Rev. E **101**, 033001 (2020).

- 2018

[Barbot 2018] A. Barbot, M. Lerbinger, A. Hernandez-Garcia, R. García-García, M. L. Falk, D. Vandembroucq and S. Patinet, *Local yield stress statistics in model amorphous solids*, Phys. Rev. E **97**, 033001 (2018).

[Dumont 2018] D. Dumont, M. Houze, P. Rambach, T. Salez, S. Patinet and P. Damman, *Emergent Strain Stiffening in Interlocked Granular Chains*, Phys. Rev. Lett. **120**, 088001 (2018). [COVER, PHYSICS , PRL EDITORS' SUGGESTION]

- 2017

[Magana 2017] A. J. Magana, M. L. Falk, C. Vieira, M. J. Reese., O. Alabi and S. Patinet, *Affordances and Challenges of Computational Tools for Supporting Modeling and Simulation Practices*, Comp. Appl. Eng. Edu. **25**, 352 (3) (2017).

- 2016

[Patinet 2016] S. Patinet, D. Vandembroucq and M. L. Falk, *Connecting Local Yield Stresses with Plastic Activity in Amorphous Solids*, Phys. Rev. Lett. **117**, 045501 (2016).

[Domino 2016] L. Domino, M. Tarpin, S. Patinet and A. Eddi, *Faraday wave lattice as an elastic metamaterial*, Phys. Rev. E **93**, 050202(R) (2016).

[Tyukodi 2016] B. Tyukodi, S. Patinet, S. Roux and D. Vandembroucq, *From depinning transition to plastic yielding of amorphous media : A soft-modes perspective*, Phys. Rev. E **93**, 063005 (2016).

- 2014

[Ding 2014] J. Ding, S. Patinet, M. L. Falk, Y. Cheng and E. Ma, *Soft spots and their structural signature in a metallic glass*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **111**, 14052 (2014).

[Patinet 2014] S. Patinet, D. Vandembroucq, *A. Hansen and S. Roux, Cracks in random brittle solids : From fiber bundles to continuum mechanics*, Eur. Phys. J. Spec. Top. **223**, 2339 (2014).

- 2013

[Patinet 2013a] S. Patinet, L. Alzate, E. Barthel, D. Dalmas, D. Vandembroucq and V. Lazarus, *Finite size effects on crack front pinning at heterogeneous planar interfaces : experimental, finite elements and perturbation approaches*, J. Mech. Phys. Sol. **61**, 311 (2013).

[Patinet 2013b] S. Patinet, D. Vandembroucq and S. Roux, *Quantitative prediction of effective toughness at random heterogeneous interfaces*, Phys. Rev. Lett. **110**, 165507 (2013).
- 2012
[Leblond 2012] J.-B. Leblond, S. Patinet, J. Frelat and V. Lazarus, *Second-order coplanar perturbation of a semi-infinite crack in an infinite body*, Eng. Frac. Mech. **90**, 129 (2012).
- 2011
[Patinet 2011c] S. Patinet and L. Proville, *Dislocation Pinning by Substitutional Impurities in an Atomic-Scale Model for Al(Mg) Solid Solutions*, Phil. Mag. **91**, 1581 (2011).
[Legrand 2011] L. Legrand, S. Patinet, J.-B. Leblond, J. Frelat, V. Lazarus and D. Vandembroucq, *Coplanar perturbation of a crack lying on the mid-plane of a plate*, Int. J. Frac. **170**, 1, 67 (2011).
[Patinet 2011b] S. Patinet, J. Frelat, V. Lazarus and D. Vandembroucq, *Propagation of planar crack fronts in heterogeneous brittle materials of finite dimensions*, Meca. & Ind. **12**, 3, 199 (2011).
[Patinet 2011a] S. Patinet, D. Bonamy and L. Proville, *Atomic-scale avalanche along a dislocation in a random alloy*, Phys. Rev. B **84**, 174101 (2011).
- 2010
[Proville 2010] L. Proville and S. Patinet, *Atomic-scale models for hardening in fcc solid solutions*, Phys. Rev. B **82**, 054115 (2010).
- 2008
[Patinet 2008] S. Patinet and L. Proville, *Depinning transition for a screw dislocation in a model solid solution*, Phys. Rev. B **78**, 104109 (2008).

Actes de conférence avec comité de lecture

[3] S. Patinet, *Substitutional Al solute interaction with edge and screw dislocation in Ni : a comparison between atomistic computation and continuum elastic theory*, Proc. MMM 2008, 840 (2008).
[2] S. Patinet, L. Proville, *Modélisation du durcissement par solution solide des alliages métalliques cubiques à faces centrées*, communication 20éme congrès CFM (2011).
[1] L. Alzate, S. Patinet, E. Barthel, D. Dalmas, *Application de la théorie du piégeage à l'étude de l'influence d'une texturation interfaciale sur la ténacité d'empilements des couches minces*, communication 20éme congrès CFM (2011).

Thèse de doctorat

S. Patinet, *Durcissement par solution solide dans les alliages métalliques cubiques à faces centrées : Étude par simulation à l'échelle atomique du glissement des dislocations en solutions solides* (2009).

Abréviations et notations

Abréviations

AQS Athermique Quasi-Statique (pour « Athermal Quasi Static »)

CDF Fonction de Répartition (pour « Cumulative Distribution Function »)

ESL Liquide Surfondu Équilibré (pour « Equilibrated Supercooled Liquid »)

FEM Méthode des Éléments Finis (pour « Finite Element Method »)

GQ Trempe Graduelle (pour « Gradual Quench »)

HTL Liquide à Haute Température (pour « High Temperature Liquid »)

IS État Inhérent (pour « Inherent State »)

MD Dynamique Moléculaire (pour « Molecular Dynamics »)

PEL Paysage d'Énergie Potentiel (pour « Potential Energy Landscape »)

RVE Volume Élémentaire Représentatif (« Representative Volume Element »)

SMC Monte Carlo d'Échange (pour « Swap Monte Carlo »)

ST Transformation de cisaillement (pour « Shear Transformation »)

STZ Zone de Transformation de Cisaillement (pour « Shear Transformation Zone »)

Notations

R_{cut}	Distance de coupure du potentiel interatomique
m, ε et σ	Masse, paramètres d'énergie et de longueur du potentiel interatomique
T_g^{sim}	Température de transition vitreuse numérique effective
μ	Modules de cisaillement
$\Delta\gamma_{xy}$	Incréments de déformation dans la direction de cisaillement simple
τ_{xy}	Contrainte dans la direction de cisaillement simple
γ_{xy}	Déformation dans la direction de cisaillement simple
R_{free}	Rayon de la région échantillonnée par la méthode des limites d'élasticité
$R_{sampling}$	Taille de la maille carrée d'échantillonnage
α	Direction de cisaillement
τ^0	Pré-contrainte locale
τ^c	Limite d'élasticité locale
$\Delta\tau^c$	Résistance plastique résiduelle locale ou distance au seuil
$\Delta\tau^p$	Chute de contrainte locale
$\Delta\tau_y$	Résistance plastique résiduelle locale projetée (en pratique $\approx \Delta\tau^c$)
ρ	Densité ou corrélation de Pearson
PE	Énergie potentielle
SRO	Ordre à courte portée

C_{xyxy}	Module de cisaillement dans la direction de cisaillement simple
PF	Fraction de Participation
R_{GC}	Échelle de coarse-graining
γ	Déformation
$\mathcal{M}$	Mode propre de basse fréquence
$nan\mu$	Non-affinité atomique
C_{min}	Corrélation de rang calculée pour le premier réarrangement
Θ	Paramètre d'ordre stérique
S	« Softness » basé sur l'apprentissage automatique
T_{ini} ou T_{p}	Température parente d'équilibre d'un liquide
ε	Déformation logarithmique (de Hencky) locale
ε^*	Déformation caractéristique d'un réarrangement
T_{MCT}	Température de couplage de mode
χ	Polarisation moyenne des résistances plastiques résiduelles
a	Taille caractéristique d'un réarrangement
$\Delta\varepsilon_0$	Déformation caractéristique d'un réarrangement
$\Delta\tau^c_{min}$	Résistance plastique résiduelle dans la direction la plus molle
T_{onset}	Température en dessous de laquelle le PEL influence la dynamique
t_α	Temps de relaxation d'un liquide
$\overrightarrow{u}_{th}$	Champs de déplacement des réarrangements thermiques entre deux ISs
$\langle \Delta r^2(t) \rangle$	Propension (« propensity » en anglais)
t_{FP}	Temps de premier passage local
ΔU	Barrière d'énergie
l	Taille d'un élément du modèle élasto-plastique
λ	Paramètre définissant l'échelle de la distribution de Weibull
k	Exposant définissant la forme de la distribution de Weibull
χ	Paramètre de la loi de distribution des amplitudes de réarrangements
$\mathcal{L}$	Erreur relative de calibration du modèle élasto-plastique
γ_{t}	Déformation caractéristique nécessaire pour converger vers l'état stationnaire

Bibliographie

[Albaret 2016] T. Albaret, A. Tanguy, F. Boioli et D. Rodney. *Mapping between atomistic simulations and Eshelby inclusions in the shear deformation of an amorphous silicon model.* Physical Review E, vol. 93, no. 5, page 053002, 2016. (Cité en pages 4 et 66.)

[Alessi 2015] R. Alessi, J.-J. Marigo et S. Vidoli. *Gradient damage models coupled with plasticity : Variational formulation and main properties.* Mechanics of Materials, vol. 80, page 351, 2015. (Cité en page 66.)

[Alix-Williams 2018] D. D. Alix-Williams et M. L. Falk. *Shear band broadening in simulated glasses.* Physical Review E, vol. 98, no. 5, page 053002, 2018. (Cité en page 65.)

[An 2011] Q. An, G. Garrett, K. Samwer, Y. Liu, S. V. Zybin, S.-N. Luo, M. D. Demetriou, W. L. Johnson et W. A. Goddard. *Atomistic Characterization of Stochastic Cavitation of a Binary Metallic Liquid under Negative Pressure.* The Journal of Physical Chemistry Letters, vol. 2, no. 11, page 1320, 2011. (Cité en page 7.)

[Andreotti 2013] B. Andreotti, Y. Forterre et O. Pouliquen. Granular media : between fluid and solid. Cambridge University Press, 2013. (Cité en page 3.)

[Argon 1979a] A. S. Argon et H. Y. Kuo. *Plastic flow in a disordered bubble raft (an analog of a metallic glass).* Materials Science and Engineering, vol. 39, no. 1, page 101, 1979. (Cité en pages 3 et 33.)

[Argon 1979b] A.S Argon. *Plastic deformation in metallic glasses.* Acta Metallurgica, vol. 27, no. 1, page 47, 1979. (Cité en page 3.)

[Asaro 1975] R. J. Asaro. *Elasto-plastic memory and kinematic-type hardening.* Acta Metallurgica, vol. 23, page 1255, 1975. (Cité en pages 33 et 35.)

[Bapst 2020] V. Bapst, T. Keck, A. Grabska-Barwińska, C. Donner, E. D. Cubuk, S. S. Schoenholz, A. Obika, A. W. R. Nelson, T. Back, D. Hassabis et P. Kohli. *Unveiling the predictive power of static structure in glassy systems.* Nature Physics, vol. 16, no. 4, page 448, 2020. (Cité en pages 37, 40 et 65.)

[Barbot 2018] A. Barbot, M. Lerbinger, A. Hernandez-Garcia, R. García-García, M. L. Falk, D. Vandembroucq et S. Patinet. *Local yield stress statistics in model amorphous solids.* Physical Review E, vol. 97, no. 3, page 033001, 2018. (Cité en pages 8, 45, 52, 63, 64, 66, 74 et 90.)

[Barbot 2020] A. Barbot, M. Lerbinger, A. Lemaître, D. Vandembroucq et S. Patinet. *Rejuvenation and shear banding in model amorphous solids.* Physical Review E, vol. 101, no. 3, 2020. (Cité en pages 45, 53, 63 et 90.)

[Baret 2002] J.-C. Baret, D. Vandembroucq et S. Roux. *Extremal Model for Amorphous Media Plasticity.* Physical Review Letters, vol. 89, page 195506, 2002. (Cité en page 30.)

[Barlow 2020] H. J. Barlow, J. O. Cochran et S. M. Fielding. *Ductile and Brittle Yielding in Thermal and Athermal Amorphous Materials.* Physical Review Letters, vol. 125, no. 16, 2020. (Cité en page 8.)

[Bauchy 2015] M. Bauchy, M. J. A. Qomi, C. Bichara, F.-J. Ulm et R. J.-M. Pellenq. *Rigidity Transition in Materials : Hardness is Driven by Weak Atomic Constraints.* Physical Review Letters, vol. 114, no. 12, page 125502, 2015. (Cité en page 6.)

[Bauschinger 1886] J. Bauschinger. *Über die Veränderung der Elastizitätsgrenze und die Festigkeit des Eisens und Stahls durch Strecken und Quetschen, durch Erwärmen und Abkühlen und durch oftmals wiederholte Beanspruchungen.* Mittheilungen aus dem Mechanisch-Technischen Laboratorium der K. Technischen Hochschuhle, vol. 13, pages 1–116, 1886. (Cité en page 33.)

[Behler 2011] J. Behler. *Atom-centered symmetry functions for constructing high-dimensional neural network potentials.* The Journal of Chemical Physics, vol. 134, no. 7, page 074106, 2011. (Cité en page 65.)

[Berthier 2007] L. Berthier et R. L. Jack. *Structure and dynamics of glass formers : Predictability at large length scales.* Physical Review E, vol. 76, no. 4, page 041509, 2007. (Cité en pages 37 et 41.)

[Bhaumik 2021] H. Bhaumik, G. Foffi et S. Sastry. *The role of annealing in determining the yielding behavior of glasses under cyclic shear deformation.* Proceedings of the National Academy of Sciences, vol. 118, no. 16, page e2100227118, 2021. (Cité en page 32.)

[Bhaumik 2022] H. Bhaumik, G. Foffi et S. Sastry. *Avalanches, Clusters, and Structural Change in Cyclically Sheared Silica Glass.* Physical Review Letters, vol. 128, no. 9, page 098001, 2022. (Cité en pages 7 et 63.)

[Boattini 2020] E. Boattini, S. Marín-Aguilar, S. Mitra, G. Foffi, F. Smallenburg et L. Filion. *Autonomously revealing hidden local structures in supercooled liquids.* Nature Communications, vol. 11, no. 1, page 5479, 2020. (Cité en pages 37 et 40.)

[Boattini 2021] E. Boattini, F. Smallenburg et L. Filion. *Averaging local structure to predict the dynamic propensity in supercooled liquids.* Physical Review Letters, vol. 127, page 088007, 2021. (Cité en page 37.)

[Bocquet 2009] L. Bocquet, A. Colin et A. Ajdari. *Kinetic Theory of Plastic Flow in Soft Glassy Materials.* Physical Review Letters, vol. 103, no. 3, page 036001, 2009. (Cité en page 66.)

[Bonn 2017] D. Bonn, M. M. Denn, L. Berthier, T. Divoux et S. Manneville. *Yield stress materials in soft condensed matter.* Reviews of Modern Physics, vol. 89, no. 3, page 035005, 2017. (Cité en page 2.)

[Bouchaud 1992] J. P. Bouchaud. *Weak ergodicity breaking and aging in disordered systems.* Journal de Physique I, vol. 2, no. 9, page 1705, 1992. (Cité en page 31.)

[Buchanan 2008] M. Buchanan. *This Economy does not compute.* New York Times, page October 1, 2008. (Cité en page v.)

[Buckley 1956] S. M. Buckley et K. M. Entwistle. *The bauschinger effect in superpure aluminum single crystals and polycrystals.* Acta Metallurgica, vol. 4, page 352, 1956. (Cité en page 33.)

[Castellanos 2019] D. F. Castellanos et M. Zaiser. *Statistical dynamics of early creep stages in disordered materials.* The European Physical Journal B, vol. 92, no. 7, page 139, 2019. (Cité en page 44.)

[Castellanos 2022] D. F. Castellanos, S. Roux et S. Patinet. *History Dependent Plasticity of Glass : A Mapping between Atomistic and Elasto-Plastic Models.* SSRN Electronic Journal, 2022. History dependent plasticity of glass : a mapping between atomistic and elasto-plastic models. (Cité en page 89.)

[Cavagna 2009] A. Cavagna. *Supercooled liquids for pedestrians.* Physics Reports, vol. 476, no. 4-6, page 51, 2009. (Cité en pages v, 37, 41 et 72.)

[Chen 2010] K. Chen, W. G. Ellenbroek, Z. Zhang, D. T. N. Chen, P. J. Yunker, S. Henkes, C. Brito, O. Dauchot, W. van Saarloos, A. J. Liu et A. G. Yodh. *Low-Frequency Vibrations of Soft Colloidal Glasses.* Physical Review Letters, vol. 105, page 025501, Jul 2010. (Cité en page 22.)

[Chen 2018] Y. Chen et A. Diaz. *Physical foundation and consistent formulation of atomic-level fluxes in transport processes.* Physical Review E, vol. 98, page 052113, 2018. (Cité en page 73.)

[Cheng 2009] Y. Q. Cheng, E. Ma et H. W. Sheng. *Atomic Level Structure in Multicomponent Bulk Metallic Glass.* Physical Review Letters, vol. 102, no. 24, page 245501, 2009. (Cité en page 63.)

[Coniglio 2004] A. Coniglio, L. De Arcangelis, E. Del Gado, A. Fierro et N. Sator. *Percolation, gelation and dynamical behaviour in colloids.* Journal of Physics : Condensed Matter, vol. 16, no. 42, page S4831, 2004. (Cité en page 41.)

[Coslovich 2019] D. Coslovich, A. Ninarello et L. Berthier. *A localization transition underlies the mode-coupling crossover of glasses.* SciPost Physics, vol. 7, no. 6, page 77, 2019. (Cité en page 37.)

[Cubuk 2015] E. D. Cubuk, S. S. Schoenholz, J. M. Rieser, B. D. Malone, J. Rottler, D. J. Durian, E. Kaxiras et A. J. Liu. *Identifying Structural Flow Defects in Disordered Solids Using Machine-Learning Methods.* Physical Review Letters, vol. 114, no. 10, page 108001, 2015. (Cité en pages 6, 21, 45 et 63.)

[Cubuk 2017] E. D. Cubuk, R. J. S. Ivancic, S. S. Schoenholz, D. J. Strickland, A. Basu, Z. S. Davidson, J. Fontaine, J. L. Hor, Y.-R. Huang, Y. Jiang, N. C. Keim, K. D. Koshigan, J. A. Lefever, T. Liu, X.-G. Ma, D. J. Magagnosc, E. Morrow, C. P. Ortiz, J. M. Rieser, A. Shavit, T. Still, Y. Xu, Y. Zhang, K. N. Nordstrom, P. E. Arratia, R. W. Carpick, D. J. Durian, Z. Fakhraai, D. J. Jerolmack, Daeyeon Lee, Ju Li, R. Riggleman, K. T. Turner, A. G. Yodh, D. S. Gianola et Andrea J. Liu. *Structure-property relationships from universal signatures of plasticity in disordered solids.* Science, vol. 358, no. 6366, page 1033, 2017. (Cité en pages 6, 63 et 65.)

[de Arcangelis 1985] L. de Arcangelis, S. Redner et H.J. Herrmann. *A random fuse model for breaking processes.* Journal de Physique Lettres, vol. 46, no. 13,

page 585, 1985. (Cité en page 9.)

[de Arcangelis 2019] L. de Arcangelis, E. Lippiello, M. Pica Ciamarra et A. Sarracino. *Induced and endogenous acoustic oscillations in granular faults.* Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences, vol. 377, no. 2136, page 20170389, 2019. (Cité en page 29.)

[Del Gado 2008] E. Del Gado, P. Ilg, M. Kröger et H. C. Öttinger. *Nonaffine Deformation of Inherent Structure as a Static Signature of Cooperativity in Supercooled Liquids.* Physical Review Letters, vol. 101, no. 9, page 095501, 2008. (Cité en page 38.)

[Deng 1989] D. Deng, A. S. Argon et S. Yip. *Simulation of Plastic Deformation in a Two-Dimensional Atomic Glass by Molecular Dynamics IV.* Philosophical Transactions of the Royal Society A, vol. 329, no. 1608, page 613, 1989. (Cité en page 33.)

[Desmond 2015] K. W. Desmond et E. R. Weeks. *Measurement of Stress Redistribution in Flowing Emulsions.* Physical Review Letters, vol. 115, no. 9, page 098302, 2015. (Cité en page 4.)

[Ding 2014] J. Ding, S. Patinet, M. L. Falk, Y. Cheng et E. Ma. *Soft spots and their structural signature in a metallic glass.* The Proceedings of the National Academy of Sciences, vol. 111, no. 39, page 14052, Septembre 2014. (Cité en pages 6, 16, 45 et 90.)

[Domino 2016] L. Domino, M. Tarpin, S. Patinet et A. Eddi. *Faraday wave lattice as an elastic metamaterial.* Physical Review E, vol. 93, no. 5, 2016. (Cité en page 90.)

[Donati 1999] C. Donati, S. C. Glotzer, P. H. Poole, W. Kob et S. J. Plimpton. *Spatial correlations of mobility and immobility in a glass-forming Lennard-Jones liquid.* Physical Review E, vol. 60, no. 3, page 3107, 1999. (Cité en page 37.)

[Du 2021] T. Du, H. Liu, L. Tang, S. S. Sørensen, M. Bauchy et M. M. Smedskjaer. *Predicting Fracture Propensity in Amorphous Alumina from Its Static Structure Using Machine Learning.* ACS Nano, vol. 15, no. 11, pages 17705–17716, 2021. PMID : 34723489. (Cité en page 63.)

[Dumont 2018] D. Dumont, M. Houze, P. Rambach, T. Salez, S. Patinet et P. Damman. *Emergent Strain Stiffening in Interlocked Granular Chains.* Physical Review Letters, vol. 120, page 088001, 2018. (Cité en page 90.)

[Dyre 2006] J. C. Dyre. *Colloquium : The glass transition and elastic models of glass-forming liquids.* Reviews of Modern Physics, vol. 78, no. 3, page 953, 2006. (Cité en page 37.)

[Ediger 2000] M. D. Ediger. *Spatially Heterogeneous Dynamics In Supercooled Liquids.* Annual Review of Physical Chemistry, vol. 51, no. 1, page 99, 2000. (Cité en page 37.)

[Eshelby 1957] J.-D. Eshelby. *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems.* Proceedings of the Royal Society of London,

vol. A241, page 376, 1957. (Cité en page 4.)

[Falk 1998] M. L. Falk et J. S. Langer. *Dynamics of viscoplastic deformation in amorphous solids.* Physical Review E, vol. 57, page 7192, 1998. (Cité en pages 5, 12, 33 et 71.)

[Fan 2021] Z. Fan et E. Ma. *Predicting orientation-dependent plastic susceptibility from static structure in amorphous solids via deep learning.* Nature Communications, vol. 12, no. 1, page 1506, 2021. (Cité en pages 63 et 65.)

[Fernández Castellanos 2021] D. Fernández Castellanos, S. Roux et S. Patinet. *Insights from the quantitative calibration of an elasto-plastic model from a Lennard-Jones atomic glass.* Comptes Rendus. Physique, vol. 22, no. S3, page 135, 2021. (Cité en page 89.)

[Ferreiro-Córdova 2020] C. Ferreiro-Córdova, E. Del Gado, G. Foffi et M. Bouzid. *Multi-component colloidal gels : interplay between structure and mechanical properties.* Soft Matter, vol. 16, no. 18, page 4414, 2020. (Cité en pages 7 et 63.)

[Fielding 2021] S. M. Fielding. *Yielding, shear banding and brittle failure of amorphous materials.* arXiv :2103.06782 [cond-mat], 2021. arXiv : 2103.06782. (Cité en page 8.)

[Fiocco 2013] D. Fiocco, G. Foffi et S. Sastry. *Oscillatory athermal quasistatic deformation of a model glass.* Physical Review E, vol. 88, no. 2, page 020301, 2013. (Cité en page 65.)

[Font-Clos 2022] F. Font-Clos, M. Zanchi, S. Hiemer, S. Bonfanti, R. Guerra, M. Zaiser et S. Zapperi. *Predicting the failure of two-dimensional silica glasses.* arXiv :2201.09723 [cond-mat, physics :physics], 2022. (Cité en page 65.)

[Frahsa 2013] F. Frahsa, A. K. Bhattacharjee, J. Horbach, M. Fuchs et T. Voigtmann. *On the Bauschinger effect in supercooled melts under shear : Results from mode coupling theory and molecular dynamics simulations.* The Journal of Chemical Physics, vol. 138, no. 12, page 12A513, 2013. (Cité en page 33.)

[Geers 2010] M. G. D. Geers, V. G. Kouznetsova et W. A. M. Brekelmans. *Multiscale computational homogenization : Trends and challenges.* Journal of Computational and Applied Mathematics, vol. 234, no. 7, page 2175, 2010. (Cité en page 9.)

[Gendelman 2015] O. Gendelman, P. K. Jaiswal, I. Procaccia, B. Sen Gupta et J. Zylberg. *Shear Transformation Zones : State determined or protocol dependent ?* Europhysics Letters, vol. 109, no. 1, page 16002, 2015. (Cité en page 25.)

[Goldstein 1969] M. Goldstein. *Viscous Liquids and the Glass Transition : A Potential Energy Barrier Picture.* Journal of Chemical Physics, vol. 51, no. 9, page 3728, 1969. (Cité en page 37.)

[Greer 2013] A.L. Greer, Y.Q. Cheng et E. Ma. *Shear bands in metallic glasses.* Materials Science and Engineering : R : Reports, vol. 74, no. 4, page 71, 2013. (Cité en pages 3, 7, 8, 28 et 65.)

[Gu 2008] X.J. Gu, S. J. Poon, G. J. Shiflet et M. Widom. *Ductility improvement*

of amorphous steels : Roles of shear modulus and electronic structure. Acta Materialia, vol. 56, no. 1, page 88, 2008. (Cité en page 7.)

[Guan 2013] P. Guan, S. Lu, M. J. B. Spector, P. K. Valavala et M. L. Falk. *Cavitation in Amorphous Solids.* Physical Review Letters, vol. 110, no. 18, page 185502, 2013. (Cité en pages 7 et 64.)

[Hentschel 2015] H. G. E. Hentschel, P. K. Jaiswal, I. Procaccia et S. Sastry. *Stochastic approach to plasticity and yield in amorphous solids.* Physical Review E, vol. 92, page 062302, 2015. (Cité en page 24.)

[Hertz 1882] H. Hertz. *Uber die Berührung fester elastischer Körper. (On the contact of elastic solids).* J. reine und angewandte Mathematik, vol. 92, page 156, 1882. (Cité en page 63.)

[Heuer 2008] A. Heuer. *Exploring the potential energy landscape of glass-forming systems : from inherent structures via metabasins to macroscopic transport.* Journal of Physics : Condensed Matter, vol. 20, no. 37, page 373101, 2008. (Cité en pages 37 et 39.)

[Hiemer 2021] S. Hiemer et S. Zapperi. *From mechanism-based to data-driven approaches in materials science.* Materials Theory, vol. 5, no. 1, page 4, 2021. (Cité en page 63.)

[Hinkle 2017] A. R. Hinkle, C. H. Rycroft, M. D. Shields et M. L. Falk. *Coarse graining atomistic simulations of plastically deforming amorphous solids.* Physical Review E, vol. 95, no. 5, page 053001, 2017. (Cité en page 75.)

[Hirth 1982] J. P. Hirth et J. Lothe. Theory of dislocations. New York, 1982. (Cité en page v.)

[Homer 2009] E. R. Homer et C. A. Schuh. *Mesoscale modeling of amorphous metals by shear transformation zone dynamics.* Acta Materialia, vol. 57, no. 9, page 2823, 2009. (Cité en page 44.)

[Hoover 1985] W. G. Hoover. *Canonical dynamics : Equilibrium phase-space distributions.* Physical Review A, vol. 31, no. 3, page 1695, 1985. (Cité en page 12.)

[Hébraud 1998] P. Hébraud et F. Lequeux. *Mode-Coupling Theory for the Pasty Rheology of Soft Glassy Materials.* Physical Review Letters, vol. 81, no. 14, page 2934, 1998. (Cité en pages 5, 31 et 33.)

[Jagla 2010] E. A. Jagla. *Shear band dynamics from a mesoscopic modeling of plasticity.* Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment, vol. 2010, no. 12, 2010. (Cité en page 44.)

[Jaiswal 2016] P. K. Jaiswal, I. Procaccia, C. Rainone et M. Singh. *Mechanical Yield in Amorphous Solids : A First-Order Phase Transition.* Physical Review Letters, vol. 116, no. 8, page 085501, 2016. (Cité en page 8.)

[Jensen 2014] K. E. Jensen, D. A. Weitz et F. Spaepen. *Local shear transformations in deformed and quiescent hard-sphere colloidal glasses.* Physical Review E, vol. 90, no. 4, page 042305, 2014. (Cité en page 4.)

[Johnson 2005] W. Johnson et K. Samwer. *A Universal Criterion for Plastic Yielding of Metallic Glasses with a (T/Tg)2/3 Temperature Dependence.* Physi-

cal Review Letters, vol. 95, no. 19, 2005. (Cité en page 40.)

[Kaiser 2021] T. Kaiser, S. Forest et A. Menzel. *A finite element implementation of the stress gradient theory.* Meccanica, vol. 56, no. 5, page 1109, 2021. (Cité en page 9.)

[Kapteijns 2020] G. Kapteijns, D. Richard et E. Lerner. *Nonlinear quasilocalized excitations in glasses : True representatives of soft spots.* Physical Review E, vol. 101, no. 3, page 032130, 2020. (Cité en page 41.)

[Kapteijns 2021] G. Kapteijns, D. Richard, E. Bouchbinder, T. B. Schrøder, J. C. Dyre et E. Lerner. *Does mesoscopic elasticity control viscous slowing down in glassforming liquids ?* The Journal of Chemical Physics, vol. 155, no. 7, page 074502, 2021. (Cité en page 38.)

[Karimi 2017] K. Karimi, E. E. Ferrero et J.-L. Barrat. *Inertia and universality of avalanche statistics : the case of slowly deformed amorphous solids.* Physical Review E, vol. 95, 2017. (Cité en page 44.)

[Karmakar 2010a] S. Karmakar, E. Lerner et I. Procaccia. *Plasticity-induced anisotropy in amorphous solids : The Bauschinger effect.* Physical Review E, vol. 82, no. 2, page 026104, 2010. (Cité en page 33.)

[Karmakar 2010b] S. Karmakar, E. Lerner et I. Procaccia. *Statistical physics of the yielding transition in amorphous solids.* Physical Review E, vol. 82, page 055103, 2010. (Cité en page 24.)

[Ketkaew 2020] J. Ketkaew, R. Yamada, H. Wang, D. Kuldinow, B. S. Schroers, W. Dmowski, T. Egami et J. Schroers. *The effect of thermal cycling on the fracture toughness of metallic glasses.* Acta Materialia, vol. 184, page 100, 2020. (Cité en pages 7 et 65.)

[Keys 2011] A. S. Keys, L. O. Hedges, J. P. Garrahan, S. C. Glotzer et D. Chandler. *Excitations Are Localized and Relaxation Is Hierarchical in Glass-Forming Liquids.* Physical Review X, vol. 1, no. 2, page 021013, 2011. (Cité en pages 37 et 41.)

[Kraych 2019] A. Kraych, E. Clouet, L. Dezerald, L. Ventelon, F. Willaime et D. Rodney. *Non-glide effects and dislocation core fields in BCC metals.* npj Computational Materials, vol. 5, no. 1, 2019. (Cité en page v.)

[Kumar 2022] Dheeraj Kumar, Sylvain Patinet, Craig E. Maloney, Ido Regev, Damien Vandembroucq et Muhittin Mungan. *Mapping out the glassy landscape of a mesoscopic elastoplastic model.* 2022. (Cité en page 89.)

[Lançon 1984] F. Lançon, L. Billard et A. Chamberod. *Structural description of a metallic glass model.* Journal of Physics F : Metal Physics, vol. 14, page 579, 1984. (Cité en page 12.)

[Le Bouil 2014] A. Le Bouil, A. Amon, S. McNamara et J. Crassous. *Emergence of Cooperativity in Plasticity of Soft Glassy Materials.* Physical Review Letters, vol. 112, no. 24, page 246001, 2014. (Cité en pages 4 et 28.)

[Leblond 2012] J.-B. Leblond, S. Patinet, J. Frelat et V. Lazarus. *Second-order coplanar perturbation of a semi-infinite crack in an infinite body.* Engineering Fracture Mechanics, vol. 90, page 129, 2012. (Cité en page 91.)

[Legrand 2011] L. Legrand, S. Patinet, J.-B. Leblond, J. Frelat, V. Lazarus et D. Vandembroucq. *Coplanar perturbation of a crack lying on the mid-plane of a plate.* International Journal of Fracture, vol. 170, no. 1, page 67, 2011. (Cité en page 91.)

[Leishangthem 2017] P. Leishangthem, A. D. S. Parmar et S. Sastry. *The yielding transition in amorphous solids under oscillatory shear deformation.* Nature Communications, vol. 8, no. 1, page 14653, 2017. (Cité en page 8.)

[Lemaitre 1990] J. Lemaitre et J. L. Chaboche. Mechanics of solid materials. Cambridge, 1990. (Cité en page 34.)

[Lemaître 2014] A. Lemaître. *Structural Relaxation is a Scale-Free Process.* Physical Review Letters, vol. 113, page 245702, 2014. (Cité en pages 38 et 75.)

[Lerbinger 2021] M. Lerbinger, A. Barbot, D. Vandembroucq et S. Patinet. *On the relevance of shear transformations in the relaxation of supercooled liquids.* arXiv :2109.12639 [cond-mat], 2021. arXiv : 2109.12639. (Cité en pages 56 et 89.)

[Lerner 2018] E. Lerner et E. Bouchbinder. *A characteristic energy scale in glasses.* The Journal of Chemical Physics, vol. 148, no. 21, page 214502, 2018. (Cité en page 38.)

[Lerner 2021] E. Lerner et E. Bouchbinder. *Low-energy quasilocalized excitations in structural glasses.* The Journal of Chemical Physics, vol. 155, no. 20, page 200901, 2021. (Cité en page 66.)

[Lewandowski 2006] J. J. Lewandowski et A. L. Greer. *Temperature rise at shear bands in metallic glasses.* Nature Materials, vol. 5, no. 1, page 15, 2006. (Cité en pages 28, 29 et 65.)

[Lin 2014a] J. Lin, E. Lerner, A. Rosso et M. Wyart. *Scaling description of the yielding transition in soft amorphous solids at zero temperature.* Proceedings of the National Academy of Sciences, vol. 111, no. 40, page 14382, Octobre 2014. (Cité en page 4.)

[Lin 2014b] J. Lin, A. Saade, E. Lerner, A. Rosso et M. Wyart. *On the density of shear transformations in amorphous solids.* Europhysics Letters, vol. 105, page 26003, 2014. (Cité en page 24.)

[Lin 2015] J. Lin, T. Gueudré, A. Rosso et M. Wyart. *Criticality in the Approach to Failure in Amorphous Solids.* Physical Review Letters, vol. 115, page 168001, 2015. (Cité en page 24.)

[Lin 2016] J. Lin et M. Wyart. *Mean-Field Description of Plastic Flow in Amorphous Solids.* Physical Review X, vol. 6, page 011005, 2016. (Cité en page 24.)

[Liu 2016] C. Liu, E. E. Ferrero, F. Puosi, J.-L. Barrat et K. Martens. *Driving rate dependence of avalanche statistics and shapes at the yielding transition.* Physical Review Letters, vol. 116, 2016. (Cité en page 44.)

[Liu 2018a] Chaoyi Liu, Pengfei Guan et Yue Fan. *Correlating defects density in metallic glasses with the distribution of inherent structures in potential energy landscape.* Acta Materialia, vol. 161, page 295, 2018. (Cité en page 73.)

[Liu 2018b] T. Liu, F. Khabaz, R. T. Bonnecaze et M. Cloitre. *On the universality*

of the flow properties of soft-particle glasses. Soft Matter, vol. 14, no. 34, page 7064, 2018. (Cité en page 3.)

[Liu 2019] H. Liu, Z. Fu, K. Yang, X. Xu et M. Bauchy. *Machine learning for glass science and engineering : A review.* Journal of Non-Crystalline Solids : X, vol. 4, page 100036, 2019. (Cité en page 63.)

[Liu 2021] C. Liu, S. Dutta, P. Chaudhuri et K. Martens. *Elastoplastic Approach Based on Microscopic Insights for the Steady State and Transient Dynamics of Sheared Disordered Solids.* Physical Review Letters, vol. 126, page 138005, 2021. (Cité en page 53.)

[Maaß 2014] R. Maaß, K. Samwer, W. Arnold et C. A. Volkert. *A single shear band in a metallic glass : Local core and wide soft zone.* Applied Physics Letters, vol. 105, no. 17, page 171902, 2014. (Cité en page 65.)

[Magana 2017] A. J. Magana, M. L. Falk, C. Vieira, M. J. Reese, O. Alabi et S. Patinet. *Affordances and challenges of computational tools for supporting modeling and simulation practices.* Computer Applications in Engineering Education, vol. 25, no. 3, page 352, 2017. (Cité en page 90.)

[Malandro 1998] D. L. Malandro et D. J. Lacks. *Molecular-level mechanical instabilities and enhanced self-diffusion in flowing liquids.* Physical Review Letters, vol. 81, no. 25, page 5576, 1998. (Cité en page 13.)

[Malek 2000] R. Malek et N. Mousseau. *Dynamics of Lennard-Jones clusters : A characterization of the activation-relaxation technique.* Physical Review E, vol. 62, page 7723, 2000. (Cité en page 33.)

[Malins 2013] A. Malins, J. Eggers, C. P. Royall, S. R. Williams et H. Tanaka. *Identification of long-lived clusters and their link to slow dynamics in a model glass former.* Journal of Chemical Physics, vol. 138, no. 12, page 12A535, 2013. (Cité en page 37.)

[Maloney 2004a] C. Maloney et A. Lemaître. *Subextensive Scaling in the Athermal, Quasistatic Limit of Amorphous Matter in Plastic Shear Flow.* Physical Review Letters, vol. 93, no. 1, 2004. (Cité en page 7.)

[Maloney 2004b] C. Maloney et A. Lemaître. *Universal Breakdown of Elasticity at the Onset of Material Failure.* Physical Review Letters, vol. 93, no. 19, 2004. (Cité en pages 13 et 29.)

[Maloney 2006a] C. E. Maloney et A. Lemaître. *Amorphous systems in athermal, quasistatic shear.* Physical Review E, vol. 74, no. 1, page 016118, 2006. (Cité en pages v et 39.)

[Maloney 2006b] Craig E. Maloney et Daniel J. Lacks. *Energy barrier scalings in driven systems.* Physical Review E, vol. 73, no. 6, page 061106, 2006. (Cité en page 40.)

[Martens 2012] K. Martens, L. Bocquet et J.-L. Barrat. *Spontaneous formation of permanent shear bands in a mesoscopic model of flowing disordered matter.* Soft Matter, vol. 8, no. 15, page 4197, 2012. (Cité en pages 28 et 29.)

[Mizuno 2013] H. Mizuno, S. Mossa et J.-L. Barrat. *Measuring spatial distribution of the local elastic modulus in glasses.* Physical Review E, vol. 87, no. 4, page

042306, 2013. (Cité en page 14.)

[Morse 2016] D. L. Morse et J. W. Evenson. *Welcome to the Glass Age*. International Journal of Applied Glass Science, vol. 7, no. 4, page 409, 2016. (Cité en page 2.)

[Mosayebi 2014] M. Mosayebi, P. Ilg, A. Widmer-Cooper et E. Del Gado. *Soft Modes and Nonaffine Rearrangements in the Inherent Structures of Supercooled Liquids*. Physical Review Letters, vol. 112, no. 10, page 105503, 2014. (Cité en page 38.)

[Mughrabi 1988] H. Mughrabi. *Dislocation clustering and long-range internal stresses in monotonically and cyclically deformed metal crystals*. Revue de Physique Appliquée, vol. 23, page 367, 1988. (Cité en page 35.)

[Murali 2011] P. Murali, T. F. Guo, Y. W. Zhang, R. Narasimhan, Y. Li et H. J. Gao. *Atomic Scale Fluctuations Govern Brittle Fracture and Cavitation Behavior in Metallic Glasses*. Physical Review Letters, vol. 107, no. 21, page 215501, 2011. (Cité en page 7.)

[Neff 2014] P. Neff, B. Eidel et R. Martin. *The axiomatic deduction of the quadratic Hencky strain energy by Heinrich Hencky*. arXiv preprint arXiv :math/1402.4027, 2014. (Cité en page 74.)

[Nicolas 2014] A. Nicolas, K. Martens, L. Bocquet et J.-L. Barrat. *Universal and non-universal features in coarse-grained models of flow in disordered solids*. Soft Matter, vol. 10, page 4648, 2014. (Cité en page 44.)

[Nicolas 2015] A. Nicolas, F. Puosi, H. Mizuno et J.-L. Barrat. *Elastic consequences of a single plastic event : Towards a realistic account of structural disorder and shear wave propagation in models of flowing amorphous solids*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 78, page 333, 2015. (Cité en page 66.)

[Nicolas 2016] A. Nicolas, J.-L. Barrat et J. Rottler. *Effects of Inertia on the Steady-Shear Rheology of Disordered Solids*. Physical Review Letters, vol. 116, no. 5, page 058303, 2016. (Cité en pages 28 et 29.)

[Nicolas 2018] A. Nicolas, E. E. Ferrero, K. Martens et J.-L. Barrat. *Deformation and flow of amorphous solids : Insights from elastoplastic models*. Reviews of Modern Physics, vol. 90, no. 4, page 045006, 2018. (Cité en pages 2, 3, 5, 8 et 28.)

[Ninarello 2017] A. Ninarello, L. Berthier et D. Coslovich. *Models and Algorithms for the Next Generation of Glass Transition Studies*. Physical Review X, vol. 7, no. 2, 2017. (Cité en pages 7, 19, 63 et 64.)

[Ozawa 2018] M. Ozawa, L. Berthier, G. Biroli, A. Rosso et G. Tarjus. *Random critical point separates brittle and ductile yielding transitions in amorphous materials*. Proceedings of the National Academy of Sciences, vol. 115, no. 26, page 6656, 2018. (Cité en pages 8, 19, 32 et 63.)

[Pampillo 1974] C.A. Pampillo et H.S. Chen. *Comprehensive plastic deformation of a bulk metallic glass*. Materials Science and Engineering, vol. 13, no. 2, page 181, 1974. (Cité en page 28.)

[Pan 2018] J. Pan, Y. X. Wang, Q. Guo, D. Zhang, A. L. Greer et Y. Li. *Extreme rejuvenation and softening in a bulk metallic glass.* Nature Communications, vol. 9, no. 1, page 560, 2018. (Cité en page 7.)

[Parmar 2020] A. D. S. Parmar, M. Ozawa et L. Berthier. *Ultrastable Metallic Glasses In Silico.* Physical Review Letters, vol. 125, no. 8, page 085505, 2020. (Cité en page 64.)

[Patinet 2008] S. Patinet et L. Proville. *Depinning transition for a screw dislocation in a model solid solution.* Physical Review B, vol. 78, no. 10, 2008. (Cité en page 91.)

[Patinet 2011a] S. Patinet, D. Bonamy et L. Proville. *Atomic-scale avalanche along a dislocation in a random alloy.* Physical Review B, vol. 84, no. 17, 2011. (Cité en page 91.)

[Patinet 2011b] S. Patinet, J. Frelat, V. Lazarus et D. Vandembroucq. *Propagation des fronts de fissure plane dans les matériaux fragiles hétérogènes de dimensions finies.* Mécanique & Industries, vol. 12, no. 3, page 199, 2011. (Cité en page 91.)

[Patinet 2011c] S. Patinet et L. Proville. *Dislocation pinning by substitutional impurities in an atomic-scale model for Al(Mg) solid solutions.* Philosophical Magazine, vol. 91, no. 11, page 1581, 2011. (Cité en page 91.)

[Patinet 2013a] S. Patinet, L. Alzate, E. Barthel, D. Dalmas, D. Vandembroucq et V. Lazarus. *Finite size effects on crack front pinning at heterogeneous planar interfaces : Experimental, finite elements and perturbation approaches.* Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 61, no. 2, page 311, 2013. (Cité en page 90.)

[Patinet 2013b] S. Patinet, D. Vandembroucq et S. Roux. *Quantitative Prediction of Effective Toughness at Random Heterogeneous Interfaces.* Physical Review Letters, vol. 110, no. 16, 2013. (Cité en page 91.)

[Patinet 2014] S. Patinet, D. Vandembroucq, A. Hansen et S. Roux. *Cracks in random brittle solids : : From fiber bundles to continuum mechanics.* The European Physical Journal Special Topics, vol. 223, no. 11, page 2339, Octobre 2014. (Cité en page 90.)

[Patinet 2016] S. Patinet, D. Vandembroucq et M. L. Falk. *Connecting Local Yield Stresses with Plastic Activity in Amorphous Solids.* Physical Review Letters, vol. 117, no. 4, 2016. (Cité en pages 45 et 90.)

[Patinet 2020] S. Patinet, A. Barbot, M. Lerbinger, D. Vandembroucq et A. Lemaître. *Origin of the Bauschinger Effect in Amorphous Solids.* Physical Review Letters, vol. 124, no. 20, 2020. (Cité en pages 45, 65 et 90.)

[Popovic 2018] M. Popovic, T. W. J. de Geus et M. Wyart. *Elastoplastic description of sudden failure in athermal amorphous materials during quasistatic loading.* Physical Review E, vol. 98, page 040901(R), 2018. (Cité en page 28.)

[Proville 2010] L. Proville et S. Patinet. *Atomic-scale models for hardening in fcc solid solutions.* Physical Review B, vol. 82, no. 5, page 054115, 2010. (Cité en page 91.)

[Puosi 2015] F. Puosi, J. Olivier et K. Martens. *Probing relevant ingredients in mean-field approaches for the athermal rheology of yield stress materials.* Soft Matter, vol. 11, no. 38, page 7639, 2015. (Cité en page 14.)

[Queyreau 2021] S. Queyreau et B. Devincre. *A Multiscale Investigation of the Physical Origins of Tension–Compression Asymmetry in Crystals and their Implications for Cyclic Behavior.* arXiv :2112.15481 [cond-mat.mtrl-sci], 2021. (Cité en page 35.)

[Radjai 2004] F. Radjai et S. Roux. The physics of granular media, chapitre Contact dynamics study of 2D granular media : critical states and relevant internal variables, pages 165–186. Wiley, Berlin, 2004. (Cité en page 33.)

[Regev 2013] I. Regev, T. Lookman et C. Reichhardt. *Onset of irreversibility and chaos in amorphous solids under periodic shear.* Physical Review E, vol. 88, no. 6, 2013. (Cité en page 8.)

[Rice 1976] J. R. Rice. *The localization of plastic deformation.* Theoretical and Applied Mechanics : Proceedings of the 14th International Congress on Theoretical and Applied Mechanics, vol. 1, page 207, 1976. (Cité en page 30.)

[Richard 2020] D. Richard, M. Ozawa, S. Patinet, E. Stanifer, B. Shang, S. A. Ridout, B. Xu, G. Zhang, P. K. Morse, J.-L. Barrat, L. Berthier, M. L. Falk, P. Guan, A. J. Liu, K. Martens, S. Sastry, D. Vandembroucq, E. Lerner et M. L. Manning. *Predicting plasticity in disordered solids from structural indicators.* Physical Review Materials, vol. 4, no. 11, page 113609, 2020. (Cité en pages 6, 7 et 90.)

[Richard 2021a] D. Richard, E. Lerner et E. Bouchbinder. *Brittle to ductile transitions in glasses : Roles of soft defects and loading geometry.* MRS Bulletin, vol. 46, no. 10, page 902, 2021. arXiv : 2103.05258. (Cité en page 8.)

[Richard 2021b] D. Richard, C. Rainone et E. Lerner. *Finite-size study of the athermal quasistatic yielding transition in structural glasses.* The Journal of Chemical Physics, vol. 155, no. 5, page 056101, 2021. (Cité en page 65.)

[Rodney 2009] D. Rodney et C. A. Schuh. *Yield stress in metallic glasses : The jamming-unjamming transition studied through Monte Carlo simulations based on the activation-relaxation technique.* Physical Review B, vol. 80, no. 18, page 184203, 2009. (Cité en page 33.)

[Rodney 2011] D. Rodney, A. Tanguy et D. Vandembroucq. *Modeling the mechanics of amorphous solids at different length scale and time scale.* Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, vol. 19, no. 8, page 083001, 2011. (Cité en pages vi, 5, 6 et 8.)

[Rothenburg 2004] L. Rothenburg et N. P. Kruyt. *Critical state and evolution of coordination number in simulated granular materials.* International Journal of Solids and Structures, vol. 41, page 5763, 2004. (Cité en page 33.)

[Rottler 2014] J. Rottler, S. S. Schoenholz et A. J. Liu. *Predicting plasticity with soft vibrational modes : From dislocations to glasses.* Physical Review E, vol. 89, page 042304, 2014. (Cité en page 24.)

[Rountree 2009] C. L. Rountree, D. Vandembroucq, M. Talamali, E. Bouchaud et

S. Roux. *Plasticity-Induced Structural Anisotropy of Silica Glass.* Physical Review Letters, vol. 102, no. 19, page 195501, 2009. (Cité en page 33.)

[Ruan 2022] D. Ruan, S. Patinet et M. L. Falk. *Predicting plastic events and quantifying the local yield surface in 3D model glasses.* Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 158, page 104671, 2022. (Cité en pages 63, 64 et 89.)

[Rycroft 2012] C. H. Rycroft et E. Bouchbinder. *Fracture Toughness of Metallic Glasses : Annealing-Induced Embrittlement.* Physical Review Letters, vol. 109, no. 19, page 194301, 2012. (Cité en page 9.)

[Sastry 1998] S. Sastry, P. G. Debenedetti et F. H. Stillinger. *Signatures of distinct dynamical regimes in the energy landscape of a glass-forming liquid.* Nature, vol. 393, no. 6685, page 554, 1998. (Cité en page 13.)

[Saw 2016] S. Saw, S. Abraham et P. Harrowell. *Nonaffine displacements and the nonlinear response of a strained amorphous solid.* Physical Review E, vol. 94, no. 2, page 022606, 2016. (Cité en page 74.)

[Schall 2010] P. Schall et M. van Hecke. *Shear Bands in Matter with Granularity.* Annual Review of Fluid Mechanics, vol. 42, no. 1, page 67, 2010. (Cité en page 3.)

[Schuh 2003] C. A. Schuh et A. C. Lund. *Atomistic basis for the plastic yield criterion of metallic glass.* Nature Materials, vol. 2, no. 7, page 449, 2003. (Cité en pages 64 et 66.)

[Schuh 2007] C. Schuh, T. Hufnagel et U. Ramamurty. *Mechanical behavior of amorphous alloys.* Acta Materialia, vol. 55, no. 12, page 4067, 2007. (Cité en pages 2, 4 et 7.)

[Senden 2010] D. J. A. Senden, J. A. W. van Dommelen et L. E. Govaert. *Strain hardening and its relation to Bauschinger effects in oriented polymers.* Journal of Polymer Science Part B : Polymer Physics, vol. 48, no. 13, page 1483, 2010. (Cité en page 33.)

[Seth 2011] J. R. Seth, L. Mohan, C. Locatelli-Champagne, M. Cloitre et R. T. Bonnecaze. *A micromechanical model to predict the flow of soft particle glasses.* Nature Materials, vol. 10, no. 11, page 838, 2011. (Cité en page 3.)

[Shang 2019] B. Shang, J. Rottler, P. Guan et J.-L. Barrat. *Local versus Global Stretched Mechanical Response in a Supercooled Liquid near the Glass Transition.* Physical Review Letters, vol. 122, no. 10, 2019. (Cité en page 8.)

[Shang 2020] B. Shang, P. Guan et J.-L. Barrat. *Elastic avalanches reveal marginal behavior in amorphous solids.* Proceedings of the National Academy of Sciences, vol. 117, no. 1, page 86, 2020. (Cité en page 8.)

[Shekhawat 2013] A. Shekhawat, S. Zapperi et J. P. Sethna. *From Damage Percolation to Crack Nucleation Through Finite Size Criticality.* Physical Review Letters, vol. 110, no. 18, page 185505, 2013. (Cité en pages 8 et 9.)

[Shi 2005a] Y. Shi et M. L. Falk. *Strain Localization and Percolation of Stable Structure in Amorphous Solids.* Physical Review Letters, vol. 95, page 095502, 2005. (Cité en pages 12, 14, 16 et 71.)

[Shi 2005b] Y. Shi et M. L. Falk. *Structural transformation and localization during simulated nanoindentation of a noncrystalline metal film.* Applied Physics Letters, vol. 86, page 011914, 2005. (Cité en page 12.)

[Shi 2006] Y. Shi et M. Falk. *Does metallic glass have a backbone ? The role of percolating short range order in strength and failure.* Scripta Materialia, vol. 54, no. 3, page 381, 2006. (Cité en page 24.)

[Shi 2007] Y. Shi, M. B. Katz, H. Li et M. L. Falk. *Evaluation of the Disorder Temperature and Free-Volume Formalisms via Simulations of Shear Banding in Amorphous Solids.* Physical Review Letters, vol. 98, page 185505, 2007. (Cité en pages 12, 16 et 33.)

[Shimada 2021] M. Shimada, D. Coslovich, H. Mizuno et A. Ikeda. *Spatial structure of unstable normal modes in a glass-forming liquid.* SciPost Physics, vol. 10, no. 1, page 1, 2021. (Cité en page 37.)

[Smessaert 2014] A. Smessaert et J. Rottler. *Structural relaxation in glassy polymers predicted by soft modes : a quantitative analysis.* Soft Matter, vol. 10, no. 42, page 8533, 2014. (Cité en page 24.)

[Sollich 1997] P. Sollich, F. Lequeux, P. Hébraud et M. E. Cates. *Rheology of Soft Glassy Materials.* Physical Review Letters, vol. 78, no. 10, page 4, 1997. (Cité en pages 5, 31 et 33.)

[Spaepen 1977] F. Spaepen. *A microscopic mechanism for steady state inhomogeneous flow in metallic glasses.* Acta Metallurgica, vol. 25, no. 4, page 407, 1977. (Cité en pages 3, 16 et 33.)

[Starr 2002] F. W. Starr, T. B. Schrøder et S. C. Glotzer. *Molecular Dynamics Simulation of a Polymer Melt with a Nanoscopic Particle.* Macromolecules, vol. 35, no. 11, page 4481, 2002. (Cité en page 63.)

[Stillinger 1985] F. H. Stillinger et T. A. Weber. *Computer simulation of local order in condensed phases of silicon.* Physical Review B, vol. 31, no. 8, page 5262, 1985. (Cité en page 63.)

[Su 2006] C. Su et L. Anand. *Plane strain indentation of a Zr-based metallic glass : Experiments and numerical simulation.* Acta Materialia, vol. 54, no. 1, page 179, 2006. (Cité en page 6.)

[Sun 2014] Y. H. Sun, D. V. Louzguine-Luzgin, S. Ketov et A. L. Greer. *Pure shear stress reversal on a Cu-based bulk metallic glass reveals a Bauschinger-type effect.* Journal of Alloys and Compounds, vol. 615, page S75, 2014. (Cité en page 33.)

[Sun 2016] Y. Sun, A. Concustell et A. L. Greer. *Thermomechanical processing of metallic glasses : extending the range of the glassy state.* Nature Reviews Materials, vol. 1, no. 9, page 16039, 2016. (Cité en page 65.)

[Tang 2021] L. Tang, H. Liu, G. Ma, T. Du, N. Mousseau, W. Zhou et M. Bauchy. *The energy landscape governs ductility in disordered materials.* Materials Horizons, vol. 8, no. 4, page 1242, 2021. (Cité en page 7.)

[Tanguy 2010] A. Tanguy, B. Mantisi et M. Tsamados. *Vibrational modes as a predictor for plasticity in a model glass.* Europhysics Letters, vol. 90, no. 1,

2010. (Cité en page 45.)

[Telford 2004] M. Telford. *The case for bulk metallic glass.* Materials Today, vol. 7, no. 3, page 36, 2004. (Cité en page 2.)

[Thompson 2009] A. P. Thompson, S. J. Plimpton et W. Mattson. *General formulation of pressure and stress tensor for arbitrary many-body interaction potentials under periodic boundary conditions.* The Journal of Chemical Physics, vol. 131, no. 15, page 154107, 2009. (Cité en page 73.)

[Thompson 2022] A. P. Thompson, H. M. Aktulga, . Berger, D. S. Bolintineanu, W. M. Brown, P. S. Crozier, P. J. in 't Veld, A. Kohlmeyer, S. G. Moore, T. D. Nguyen, R. Shan, M. J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott et S. J. Plimpton. *LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales.* Computer Physics Communications, vol. 271, page 108171, 2022. (Cité en page 12.)

[Tong 2018] H. Tong et H. Tanaka. *Revealing Hidden Structural Order Controlling Both Fast and Slow Glassy Dynamics in Supercooled Liquids.* Physical Review X, vol. 8, no. 1, page 011041, 2018. (Cité en pages 21, 37 et 41.)

[Tong 2019] H. Tong et H. Tanaka. *Structural order as a genuine control parameter of dynamics in simple glass formers.* Nature Communications, vol. 10, no. 1, page 5596, 2019. (Cité en pages 37 et 40.)

[Tong 2020] H. Tong et H. Tanaka. *Role of Attractive Interactions in Structure Ordering and Dynamics of Glass-Forming Liquids.* Physical Review Letters, vol. 124, no. 22, page 225501, 2020. (Cité en page 37.)

[Trachenko 2016] K. Trachenko et V. V. Brazhkin. *Collective modes and thermodynamics of the liquid state.* Reports on Progress in Physics, vol. 79, no. 1, page 016502, 2016. (Cité en page v.)

[Tsamados 2009] M. Tsamados, A. Tanguy, C. Goldenberg et J.-L. Barrat. *Local elasticity map and plasticity in a model Lennard-Jones glass.* Physical Review E, vol. 80, no. 2, page 026112, 2009. (Cité en pages 6, 8, 15, 16, 45, 52 et 66.)

[Tüzes 2017] D. Tüzes, P. D. Ispánovity et M. Zaiser. *Disorder is good for you : the influence of local disorder on strain localization and ductility of strain softening materials.* International Journal of Fracture, vol. 205, no. 2, page 139, 2017. (Cité en page 28.)

[Tyukodi 2016] B. Tyukodi, S. Patinet, S. Roux et D. Vandembroucq. *From depinning transition to plastic yielding of amorphous media : A soft-modes perspective.* Physical Review E, vol. 93, no. 6, page 063005, 2016. (Cité en pages 8, 28, 44 et 90.)

[Tyukodi 2022] Botond Tyukodi, Armand Barbot, Reinaldo Garciá-Garciá, Matthias Lerbinger, Sylvain Patinet et Damien Vandembroucq. *Coarse-graining amorphous plasticity : impact of rejuvenation and disorder.* 2022. (Cité en page 89.)

[Vandembroucq 2011] D. Vandembroucq et S. Roux. *Mechanical noise dependent aging and shear banding behavior of a mesoscopic model of amorphous plasticity.* Physical Review B, vol. 84, no. 13, 2011. (Cité en pages 28 et 31.)

[Vasisht 2020a] V. V. Vasisht et E. Del Gado. *Computational study of transient shear banding in soft jammed solids.* Physical Review E, vol. 102, no. 1, page 012603, 2020. (Cité en page 29.)

[Vasisht 2020b] V. Venkatesh Vasisht, G. Roberts et E. Del Gado. *Emergence and persistence of flow inhomogeneities in the yielding and fluidization of dense soft solids.* Physical Review E, vol. 102, no. 1, page 010604, 2020. (Cité en page 28.)

[Vasoya 2019] M. Vasoya, B. Kondori, A. A. Benzerga et A. Needleman. *Limits on Transformation Strains for Non-Negative Dissipation.* Journal of Applied Mechanics, vol. 86, no. 5, 03 2019. 051005. (Cité en page 47.)

[Vlassopoulos 2014] D. Vlassopoulos et M. Cloitre. *Tunable rheology of dense soft deformable colloids.* Current Opinion in Colloid & Interface Science, vol. 19, no. 6, page 561, 2014. (Cité en page 3.)

[Vollmayr-Lee 2004] K. Vollmayr-Lee. *Single particle jumps in a binary Lennard-Jones system below the glass transition.* Journal of Chemical Physics, vol. 121, no. 10, page 4781, 2004. (Cité en page 37.)

[Wang 2015] B. Wang, Y. Yu, Y. J. Lee et M. Bauchy. *Intrinsic Nano-Ductility of Glasses : The Critical Role of Composition.* Frontiers in Materials, vol. 2, 2015. (Cité en page 63.)

[Widmer-Cooper 2004] A. Widmer-Cooper, P. Harrowell et H. Fynewever. *How Reproducible Are Dynamic Heterogeneities in a Supercooled Liquid ?* Physical Review Letters, vol. 93, no. 13, page 135701, 2004. (Cité en page 39.)

[Widmer-Cooper 2008] A. Widmer-Cooper, H. Perry, P. Harrowell et D. R. Reichman. *Irreversible reorganization in a supercooled liquid originates from localized soft modes.* Nature Physics, vol. 4, no. 9, page 711, 2008. (Cité en page 38.)

[Widmer-Cooper 2009] A. Widmer-Cooper et P. Harrowell. *Central role of thermal collective strain in the relaxation of structure in a supercooled liquid.* Physical Review E, vol. 80, no. 6, page 061501, 2009. (Cité en pages 37 et 39.)

[Xi 2005] X. K. Xi, D. Q. Zhao, M. X. Pan, W. H. Wang, Y. Wu et J. J. Lewandowski. *Fracture of Brittle Metallic Glasses : Brittleness or Plasticity.* Physical Review Letters, vol. 94, no. 12, page 125510, 2005. (Cité en page 9.)

[Xiang 2022] Xing Xiang, Sylvain Patinet, Sebastian Volz et Yanguang Zhou. *Quasilocalized Vibrational Modes as Efficient Heat Carriers in Glasses.* 2022. (Cité en page 89.)

[Xu 2021] B. Xu, M. L. Falk, S. Patinet et P. Guan. *Atomic nonaffinity as a predictor of plasticity in amorphous solids.* Physical Review Materials, vol. 5, no. 2, page 025603, 2021. (Cité en page 89.)

[Yeh 2019] W.-T. Yeh, M. Ozawa, M. Kunimasa, T. Kawasaki et L. Berthier. *Glass stability changes the nature of yielding under oscillatory shear.* arXiv : :cond-mat/1911.12951, 2019. (Cité en page 32.)

[Yu 2015] Y. Yu, M. Wang, D. Zhang, B. Wang, G. Sant et M. Bauchy. *Stretched Exponential Relaxation of Glasses at Low Temperature.* Physical Review

Letters, vol. 115, no. 16, page 165901, 2015. (Cité en page 41.)

[Zhang 2022] Y. Zhang, H. Liu, S. Sundararaman, L. Huang et Y. Shi. *Tensile ductility and necking in consolidated amorphous alumina.* Journal of the American Ceramic Society, vol. 105, no. 2, page 958, 2022. (Cité en pages 2 et 7.)

[Zimmerman 2009] J. A. Zimmerman, D. J. Bammann et H. Gao. *Deformation gradients for continuum mechanical analysis of atomistic simulations.* International Journal of Solids and Structures, vol. 46, page 238, 2009. (Cité en page 75.)

Modélisation numérique de la plasticité des matériaux amorphes

Résumé : Bien que les solides amorphes soient omniprésents dans la nature et possèdent de nombreuses applications industrielles (verre, gel, matériaux granulaires...), la compréhension fondamentale de leur comportement mécanique reste encore limitée. Ces matériaux désordonnés présentent une réponse mécanique universelle caractérisée par des événements d'écoulement localisés qui appellent à une compréhension globale.
Le noeud du problème provient de leur structure désordonnée empêchant l'identification de défauts d'écoulement topologiques comme c'est le cas dans les cristaux. À l'échelle des particules, la plasticité et le dommage se produisent par des réarrangements irréversibles. Ces transformations de cisaillement peuvent s'agréger sous forme d'avalanche ou former des bandes de cisaillement impliquant toutes les échelles spatiales. De plus, la réponse mécanique de ces systèmes hors d'équilibre dépend de manière cruciale des détails des interactions entre particules et de leur l'histoire thermomécanique.
Dans ce travail, nous développons une méthode pour calculer les limites d'élasticité locales à l'échelle atomique dans des verres bidimensionnels modèles obtenus via différents protocoles de trempe. Cette technique nous permet d'échantillonner efficacement les seuils de réarrangements plastiques locaux, de manière non perturbative, dans différentes directions de chargement et sur des échelles de longueur contrôlées. Les emplacements de réarrangement plastique lors du cisaillement sont fortement corrélés avec les zones molles des états trempés. Dans les verres ultra-stables, les plus pertinents d'un point de vue expérimental, les limites d'élasticité locale s'avèrent être l'un des meilleurs indicateurs structuraux pour prédire l'activité plastique dans les solides amorphes athermiques.
Nous montrons que cette méthode est très utile pour capturer les dépendances de barrières à la préparation du verre, à la formation des bandes de cisaillement et l'anisotropie induite par une déformation plastique. Il s'agit donc un outil idéal pour documenter et modéliser ce qui se passe « à l'intérieur » d'un solide amorphe et mieux caractériser la relation entre structure et plasticité. D'un point de vue pratique, nous montrons de plus que cette méthode permet d'envisager des stratégies de modélisation multi-échelles quantitatives.

Mots clés : Plasticité, amorphe, limite d'élasticité locale, simulation atomistique, modèle élasto-plastique

Numerical modeling of the plasticity of amorphous materials

Abstract : Although amorphous solids are ubiquitous in nature and have many industrial applications (glass, gel, granular materials...), the fundamental understanding of their mechanical behaviour is still limited. These disordered materials exhibit a universal mechanical response characterized by localized flow events that call for a global understanding.
The crux of the problem comes from their disordered structure, preventing the identification of topological flow defects, as in crystals. On the particle scale, plasticity and damage occur through irreversible rearrangements. These shear transformations can aggregate as avalanches or form shear bands involving all spatial scales. Moreover, the mechanical response of these non-equilibrium systems crucially depends on the details of the particle interactions and their thermomechanical history.
In this work, we develop a method to compute the local yield stress on the atomic scale in two-dimensional model glasses obtained through different tempering protocols. This technique allows us to efficiently sample local plastic rearrangement thresholds, in a non-perturbative way, in different loading directions, and on controlled length scales. The locations of plastic rearrangements during system loading are strongly correlated with the soft zones of the quenched states. In ultra-stable glasses, the most relevant from an experimental point of view, the local yield stress turns out to be one of the best structural indicators to predict plastic activity in athermal amorphous solids.
We show that this method is highly helpful for capturing the dependencies of barriers on glass preparation, shear band formation and plastic deformation-induced anisotropy. Therefore, it is an ideal tool for documenting and modelling what is happening "inside" an amorphous solid and better characterizing the relationship between structure and plasticity. From a practical point of view, we also show that this method makes it possible to consider quantitative multiscale modelling strategies.

Keywords : Plasticity, amorphous, local yield stress, atomistic simulation, elasto-plastic model