



HAL
open science

Étude du comportement mécanique de nanoparticules isolées et intégrées dans une matrice métallique. Application aux superalliages base Nickel

Alla Ndiaye Dieng

► **To cite this version:**

Alla Ndiaye Dieng. Étude du comportement mécanique de nanoparticules isolées et intégrées dans une matrice métallique. Application aux superalliages base Nickel. Autre. ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique - Poitiers, 2023. Français. NNT : 2023ESMA0018 . tel-04599466

HAL Id: tel-04599466

<https://theses.hal.science/tel-04599466>

Submitted on 3 Jun 2024

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.

THÈSE

Pour l'obtention du Grade de
DOCTEUR DE L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE DE MÉCANIQUE ET
D'AÉROTECHNIQUE
(Diplôme national – Arrêté du 25 mai 2016 modifié par l'arrêté du 26 août 2022)

École doctorale :
Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Energétique

Secteur de recherche :
MÉCANIQUE DES SOLIDES, DES MATÉRIAUX, DES STRUCTURES ET DES SURFACES

Présentée par :
ALLA NDIAYE DIENG

Étude du comportement mécanique de nanoparticules isolées et intégrées
dans une matrice métallique - application aux superalliages base Nickel

Directeur de thèse : Jean-Claude GRANDIDIER
Co-encadrante de thèse : Céline GERARD

Soutenue le 10 Juillet 2023
devant la Commission d'Examen

JURY

Rapporteurs :

Marc FIVEL, Directeur de Recherche CNRS, SIMAP, Grenoble Alpes
Dan MORDEHAI, Professeur, Technion University, Haïfa, Israël

Membres du jury :

Joël DOUIN, Directeur de Recherche, CNRS-CEMES, Toulouse
Erik BITZEK, Professeur, Max-Planck Institut, Düsseldorf, Allemagne
Sandrine BROCHARD, Professeure des Universités, Université de Poitiers, Poitiers
Jonathan CORMIER, Maître de conférences, ISAE-ENSMA, Poitiers
Céline GERARD, Chargée de Recherche CNRS, ISAE-ENSMA, Poitiers
Jean-Claude GRANDIDIER, Professeur des Universités, ISAE-ENSMA, Poitiers

THÈSE

Pour l'obtention du Grade de
DOCTEUR DE L'ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE DE MÉCANIQUE ET
D'AÉROTECHNIQUE
(Diplôme national – Arrêté du 25 mai 2016 modifié par l'arrêté du 26 août 2022)

École doctorale :
Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Energétique

Secteur de recherche :
MÉCANIQUE DES SOLIDES, DES MATÉRIAUX, DES STRUCTURES ET DES SURFACES

Présentée par :
ALLA NDIAYE DIENG

Étude du comportement mécanique de nanoparticules isolées et intégrées
dans une matrice métallique - application aux superalliages base Nickel

Directeur de thèse : Jean-Claude GRANDIDIER
Co-encadrante de thèse : Céline GERARD

Soutenue le 10 Juillet 2023
devant la Commission d'Examen

JURY

Rapporteurs :

Marc FIVEL, Directeur de Recherche CNRS, SIMAP, Grenoble Alpes
Dan MORDEHAI, Professeur, Technion University, Haïfa, Israël

Membres du jury :

Joël DOUIN, Directeur de Recherche, CNRS-CEMES, Toulouse
Erik BITZEK, Professeur, Max-Planck Institut, Düsseldorf, Allemagne
Sandrine BROCHARD, Professeure des Universités, Université de Poitiers, Poitiers
Jonathan CORMIER, Maître de conférences, ISAE-ENSMA, Poitiers
Céline GERARD, Chargée de Recherche CNRS, ISAE-ENSMA, Poitiers
Jean-Claude GRANDIDIER, Professeur des Universités, ISAE-ENSMA, Poitiers

REMERCIEMENTS

JE voudrais tout d'abord exprimer mes plus profonds remerciements à mon directeur de thèse Jean-Claude, et à ma co-directrice de thèse Céline, pour leur soutiens sans faille tant sur le plan professionnelle que sur le plan personnelle. La route a été longue, mais je ne me suis jamais senti seul grâce à votre aide incommensurable. Je suis heureux d'avoir eu la chance de travailler à vos côtés.

J'aimerai ensuite adresser mes chaleureux remerciements à Jonathan pour son soutien indéfectible, et ceci pendant toute la durée de la thèse. Si cette thèse a puis être réalisée, c'est en grande partie grâce à ton aide.

Je souhaite également remercier toute l'équipe ENDO pour l'accueil chaleureux qu'elle m'a offert. Grâce à votre ouverture et votre accessibilité, je me suis toujours senti chez moi au labo.

Ce travail n'aurait pas pu être réaliser sans l'aide infailible de mes collègues et amis doctorants. L'ambiance au labo est unique et extrêmement enrichissante. À vos côtés mes amis, j'ai appris énormément de choses qui me seront sans doute d'une aide inestimable dans la suite de ma carrière. J'aimerai dire merci à toutes les personnes qui ont contribuées au maintien d'une bonne ambiance mêlant convivialité et entraide. Merci d'abord aux anciens : Coline, Clément, Nicolas, Luciana, Cyril, Sarah, Happy ...; À mes promotionnaires : Guillaume, Maxime, Julie M., Florent, Anas, sans oublier Alark et Edgar. À ceux qui nous ont rejoints dans cette aventure : Mitia, Manu, Julie B., Quentin ...

Je pense également une liste non exhaustive de personne que j'aimerai remercier pour leur ouverture, leur aide et leur accessibilité : Théotime, Marjolaine, Samuel, Azdine, Bonickel, Antonio, Fabio, Florence, Véronique ...

Je remercie également mes amis qui sont toujours présent dans ma vie et me soutiennent quelque soit les circonstances : Lamine, Biteye, Oumaami, Ali ... Je sais que je peux toujours compter sur vous les gars.

J'aimerai enfin remercier ma femme Astou pour tous les sacrifices qu'elle a fait pour me soutenir. Ce n'était pas facile, mais grâce à ton soutien, je me suis toujours senti capable. Gros bisous à toi et à nos deux lumières.

Merci également à ma mère et à mes sœurs, je vous adore!!!

Poitiers, le 31 mai 2024.

TABLE DES MATIÈRES

TABLE DES MATIÈRES	vi
INTRODUCTION	2
1 ANALYSE BIBLIOGRAPHIQUE	4
2 MÉTHODOLOGIE	50
3 COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES NANOPARTICULES DE Ni_3Al	102
4 COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES SYSTÈMES $\gamma' / \gamma-Ni_3Al/Ni$	144
5 INFLUENCE DE LA MORPHOLOGIE ET DE LA FRACTION VOLUMIQUE DES PRÉCIPITÉS SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES SYSTÈMES $\gamma' / \gamma-Ni_3Al/Ni$	182
CONCLUSION GÉNÉRALE ET PERSPECTIVES	222
BIBLIOGRAPHIE	230
ANNEXES	245
A IMPACT DU MODÈLE DE CHAMP DE FORCE SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES NANOPARTICULES ISOLÉES	247
B IMPACT DE LA MÉTHODE DE THERMALISATION SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE	253
C MÉCANISME DE PLASTICITÉ À HAUTES TEMPÉRATURES	259
D DISCUSSION SUR LE SIGNE DU PARAMÈTRE DE MISFIT PAR RAPPORT AUX MOUVEMENTS DES DISLOCATIONS	265
LISTE DES FIGURES	269
LISTE DES TABLEAUX	285

INTRODUCTION ET CONTEXTE

POUR assurer en permanence la sécurité de l'Homme et de l'environnement dans lequel il vit, les matériaux utilisés, notamment dans le domaine des transports, sont appelés à être optimisés. Ainsi, une diminution de l'émission des gaz à effet de serre, laquelle est associée à une réduction de la consommation de carburant, peut être réalisée en abaissant la masse volumique du matériau [Appert, 2014], ou en optimisant sa microstructure, enfin d'en améliorer les performances. Pour continuer à garantir la résistance des matériaux dans des conditions de fonctionnement qui deviennent de plus en plus complexes et variées, les ingénieurs et les mécaniciens ne cessent d'inventer de nouveaux procédés de fabrication, afin d'obtenir des performances maximales à moindres coûts [Durgun and Ertan, 2014]. Cependant, quelle que soit la famille de matériaux considérée, le meilleur choix de ceux-ci nécessite une bonne compréhension de leurs mécanismes de déformation et d'endommagement, qui doit s'appuyer sur des études poussées. L'optimisation de la microstructure de ces matériaux permet d'atteindre des propriétés spécifiques très élevées. Par exemple, la réduction de la taille des renforts d'un matériau nanocomposite s'accompagne souvent d'une augmentation de sa résistance mécanique [Sumita et al., 1984]. De même, lorsque la taille des précipités d'un superalliage base nickel diminue, sa limite d'élasticité augmente [Harte et al., 2020, Grant et al., 2012].

Particulièrement, les superallages base nickel utilisés dans la fabrication des moteurs d'avion présentent ces mêmes enjeux majeurs, du fait de la criticité des éléments propulseurs. Il est ainsi crucial de bien connaître leur comportement. Ces matériaux présentent des microstructures complexes à plusieurs échelles, y compris nanométriques, qui évoluent avec les traitements thermiques et/ou les histoires thermiques pendant leur utilisation. En conséquence, pour comprendre le comportement mécanique de ces matériaux, il est nécessaire de développer des outils numériques capables de prendre en compte le rôle joué par les différentes parties (matrice, précipité, interface) qui constituent cette microstructure. De plus, cette connaissance ouvre la voie de l'optimisation de ces matériaux ou au moins d'en donner les pistes.

L'objectif de cette thèse s'inscrit dans cette thématique : il s'agit de construire des modèles pour mieux comprendre le comportement mécanique des nanoparticules/nanoprécipités,

leur rôle, ainsi que le rôle de l'interface entre les phases matrice et renforts, dans le comportement mécanique des matériaux métalliques nanostructurés, et plus spécifiquement des superalliages base nickel.

Dans le chapitre qui suit, l'état de l'art sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées et dans une matrice, avec un focus sur les superalliages base nickel, est présenté.

Une brève introduction du comportement mécanique des nanomatériaux (nano-objets et nanocomposites) est détaillée dans un premier temps.

Il est ensuite discuté, des études expérimentales et numériques dans lesquelles sont abordées les questions d'effet de taille, de forme et/ou d'orientation cristallographique sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées. L'objectif est ici de s'interroger sur les techniques de simulation à utiliser et revisiter certains résultats issus de la bibliographie.

Enfin, cette bibliographie s'intéresse aux travaux effectués sur les systèmes métalliques multiphasés et nanostructurés tels que les superalliages base nickel dans lesquels, ces nanoparticules (précipités) se retrouvent sous forme de renforts. La microstructure type des superalliages base nickel est tout d'abord présentée avec une attention particulière sur la caractérisation des différentes phases (matrice, précipités et interfaces). Un focus est ensuite effectué sur les propriétés thermomécaniques de ces superalliages base nickel avant de faire une analyse de leur comportement mécanique. L'impact de la température, de l'interface entre les phases (renforts et matrice), de la taille des renforts et de leur fraction volumique sur le comportement mécanique est aussi discuté. Au terme de cette analyse, le travail de thèse sera défini.

ANALYSE BIBLIOGRAPHIQUE

SOMMAIRE

BRÈVE INTRODUCTION SUR LES NANOMATÉRIAUX ET ORIENTATION DE NOTRE ÉTUDE . . .	6
Nano-objets	6
Matériaux nanocomposites	7
COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES NANOPARTICULES ISOLÉES	10
Études expérimentales	10
Études numériques	16
LES SUPERALLIAGES BASE NICKEL : PROPRIÉTÉS ET COMPORTEMENT MÉCANIQUE . . .	26
Organisation de la microstructure	27
Caractérisation de l'interface γ' / γ dans les superalliages base nickel	31
Propriétés thermiques et mécaniques des superalliages base nickel	35
Comportement mécanique des superalliages base nickel : mécanismes dislocationnels	39
Comportement mécanique des superalliages base nickel : asymétrie en trac-	
tion/compression	44
CONCLUSION DU CHAPITRE	47
Ce qui est connu	47
Les lacunes et les questions de fond	47
Programme de travail	48

=====

BRÈVE INTRODUCTION SUR LES NANOMATÉRIAUX ET ORIENTATION DE NOTRE ÉTUDE

Un nanomatériau est un matériau comportant au moins une phase ayant au moins une dimension caractéristique nanométrique (nanopiliers, nanofils, nanofilms, nanoparticules, nanocomposites, polycristaux à nanograins, etc.).

Nano-objets

Un nano-objet peut être défini comme un objet ayant au moins une dimension nanométrique (nanopiliers, nanofils, nanofilms, nanoparticules). Ces nano-objets, dotés d'excellentes propriétés électromécaniques, sont souvent utilisés pour la fabrication de dispositifs nanoélectriques tels que des circuits nanoélectriques, les nanoactionneurs [Midolo et al., 2018, Ekinici and Roukes, 2005]. La connaissance du comportement mécanique des matériaux constituant ces nano-objets est indispensable pour leur bonne application. Par exemple, la compréhension de certains problèmes mécaniques tels que les problèmes de friction sont d'une importance capitale pour une éventuelle résolution des problèmes de fiabilité qui limitent l'application pratique des systèmes nano-électro-mécaniques [Buchnev et al., 2016]. Des études ont montré que les propriétés électriques peuvent en effet être affectées par les propriétés mécaniques [Martel et al., 1998].

Le comportement mécanique des nano-objets diffère de celui des matériaux massifs par leur différence en termes de rapport surface/volume. Si dans les matériaux massifs, le comportement mécanique est souvent piloté par des propriétés volumiques, les propriétés surfaciques ont des impacts non négligeables à la fois sur les propriétés mécaniques et sur le mécanisme de plasticité des nano-objets [Thilly et al., 2012]. En effet, lorsque la taille du matériau tend vers des valeurs nanométriques, on constate souvent une amélioration des propriétés élastiques et plastiques du matériau. Un module d'élasticité plus grand a été trouvé pour des nanofils de ZnO comparé au module d'élasticité du matériau massif (Figure 1.1a). La limite d'élasticité des nanofils de Pd augmente de manière significative, lorsque leur diamètre devient inférieur à $100nm$ (Figure 1.1b). Des comportements plastiques très différents induits par des mécanismes de plasticité différents peuvent être observés entre les nano-objets et leur matériau massif correspondant. Des études expérimentales de même que des simulations atomistiques ont montré que le silicium, qui est un matériau fragile à l'échelle macroscopique, devient très ductile à l'échelle nanométrique [Texier et al., 2019, Gerberich et al., 2003]. La Figure 1.2 montre des traces de dislocations dans un nanopillier de silicium comprimé qui témoignent d'un mode de déformation plas-

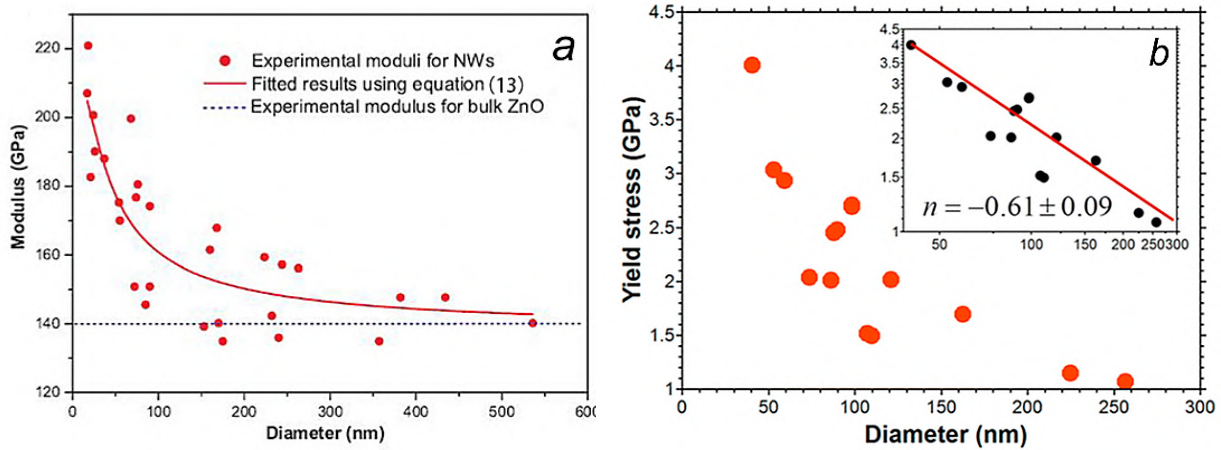


FIGURE 1.1 – (a)-Variation du module d'élasticité des nanofils de ZnO en fonction de leur diamètre comparé au module d'élasticité du matériau massif correspondant [Chen et al., 2006], (b)-Variation de la limite d'élasticité des nanofils de Pd en fonction de leur diamètre [Seo et al., 2013].

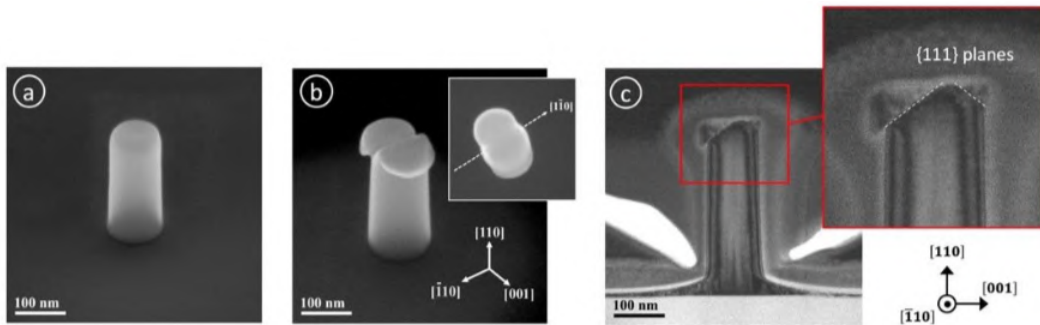


FIGURE 1.2 – Compression sous microscope électronique d'un nano-pillier de silicium (a)-avant déformation, (b)-nano-pillier déformé par compression, (c)-mise en évidence des plans de glissement (ici plans $\{111\}$) dans lesquels les cisaillements ont été observés [Texier et al., 2019].

tique. Les traces de dislocations ont été initiées à la surface du nanopilier, contrairement au mécanisme de plasticité observé dans les matériaux massifs où les processus de nucléation de dislocations ont lieu dans le volume [Frank and Read Jr, 1950, Fujita and Yamada, 1970, Li et al., 2021].

Matériaux nanocomposites

Un matériau composite est issu de l'association de plusieurs matériaux non miscibles ayant des propriétés chimiques, physiques et/ou mécaniques différentes pour former un seul matériau possédant des propriétés issues de la combinaison des caractéristiques de ces différents constituants. Le matériau est dit nano-composite lorsqu'au moins une des phases qui le constituent a au moins une dimension nanométrique. Le besoin d'utiliser ces matériaux ne cesse d'augmenter du fait de leurs propriétés exceptionnelles (propriétés multi-physiques, résistance thermique et mécanique, rigidité, légèreté) qui sont en phase

avec les besoins industriels actuels [Jović and Milićević, 2017, Carvalho et al., 2015, Sundaram and Mahamani, 2015].

Plus particulièrement, certains matériaux nanocomposites sont composés de deux phases. Une phase continue, appelée matrice, et une phase discontinue constituée par les renforts. Grâce à la matrice, les renforts sont protégés contre les éventuelles agressions provenant du milieu extérieur et peuvent cohabiter ensemble permettant ainsi la distribution et le transfert de charges entre les renforts en cas de sollicitations. La matrice peut être du polymère, de la céramique, du métal pur ou un alliage de métaux [Richardson, 1987]. Les renforts eux sont souvent introduits pour des besoins de résistance (mécaniques, thermiques), raison pour laquelle ce sont souvent des céramiques ou des métaux.

Les propriétés de ces matériaux nanocomposites dépendent de plusieurs paramètres tels que la densité des renforts, la forme des renforts, la taille des renforts, la dispersion des renforts ainsi que de l'interface entre la matrice et les renforts [Sumita et al., 1984, Saber-Samandari and Afaghi-Khatibi, 2007]. Les renforts utilisés dans les matériaux nanocomposites peuvent être des fibres ou des particules, selon le rapport entre leur longueur et leur diamètre (aspect ratio). Lorsque les dimensions du renfort dans les trois directions ont des tailles proches, on considère que le renfort est une particule. Le renfort est dit nanoparticule lorsque ses trois dimensions sont nanométriques.

Dans le domaine de la mécanique, l'utilisation des nanoparticules comme renfort dans les matériaux nanocomposites permet d'améliorer les propriétés mécaniques (rigidité, limite d'élasticité, résistance au fluage) de façon considérable comparativement à l'utilisation de renforts micrométriques dans les matériaux composites traditionnels [Sumita et al., 1982, Ng et al., 2001]. Dans le domaine de l'industrie automobile, les nanoparticules peuvent être utilisées comme des agents d'anti-usure dans la fabrication de lubrifiants [Battez et al., 2008].

Les questionnements relatifs aux matériaux nanostructurés et à l'interface nanoparticule/matrice, concernent également certains alliages métalliques multiphasés. En effet, ceux-ci sont constitués de nano-précipités (ou de nano-dispersoïdes dans certains cas) au sein d'une matrice métallique. C'est notamment le cas des superalliages base nickel, qui ont par ailleurs d'excellentes propriétés mécaniques grâce à l'organisation de leur microstructure. La Figure 1.3 montre l'exemple d'une microstructure de superalliages base nickel dans laquelle on distingue la phase γ (matrice) et des phases γ' (précipités) secondaires et tertiaires ([Wang et al., 2012]).

Les études menées dans le cadre de cette thèse ont pour objectif de modéliser des sys-

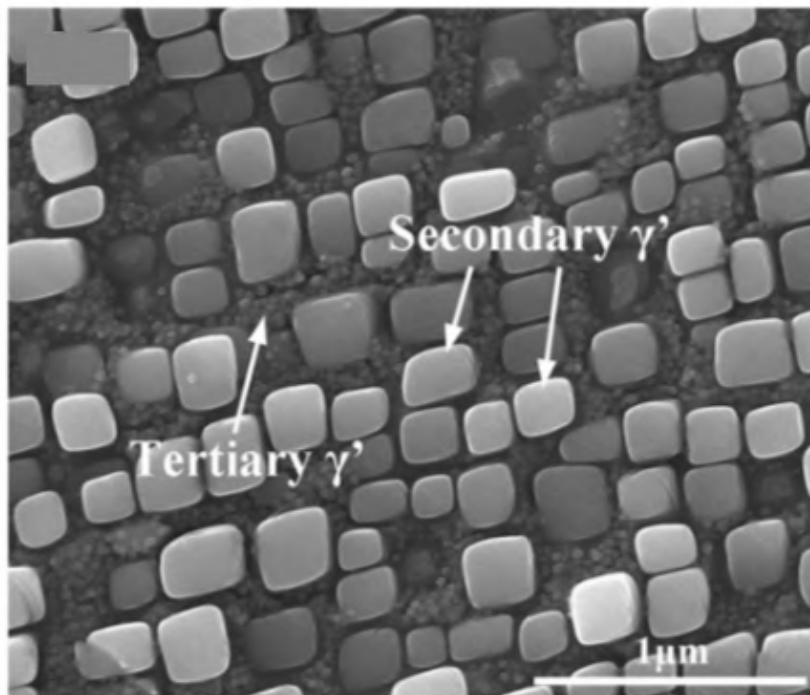


FIGURE 1.3 – Exemple de microstructure d'un superalliage base nickel composé d'une matrice γ dans laquelle se trouve des précipités γ' (secondaires et tertiaires) [Wang et al., 2012].

tèmes simplifiés représentatifs de ces superalliages base nickel composée d'une matrice métallique (γ) renforcée par des précipités métalliques (γ').

Plus précisément, l'idée sous-jacente est de voir comment, avec la technique de calcul de dynamique moléculaire, il est possible d'expliquer certains comportements mécaniques (dépendance du comportement mécanique à la fraction volumique des précipités et à la direction de sollicitation, dépendance de la limite d'élasticité et de la résistance mécanique à la température) constatés sur les superalliages base nickel. Il s'agit également de comparer les comportements mécaniques d'une nanoparticule, selon qu'elle est intégrée dans une matrice, ou isolée.

Pour cela, dans la première partie de ce chapitre, une revue bibliographique non exhaustive des travaux sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées pouvant être vues comme des renforts (précipités) dans les superalliages base nickel est présentée. La seconde partie aborde les comportements mécaniques des superalliages base nickel dans lesquels on retrouve ces renforts métalliques généralement appelés précipités.

COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES NANOPARTICULES ISOLÉES

Définis souvent comme des nanomatériaux dont les trois dimensions ne dépassent pas les $100nm$, les nanoparticules sont utilisées dans plusieurs domaines d'applications (industrie automobile, biologie, électronique, mécanique ...) grâce à leurs propriétés très intéressantes. Cependant, elles sont rarement utilisées de façon isolée, sauf dans certains cas particuliers, tel qu'en biologie où les nanoparticules peuvent servir de capteurs biologiques avancés [Howes et al., 2014]. Néanmoins, il est indispensable de comprendre le comportement mécanique de ces nanoparticules, afin de mieux maîtriser le comportement mécanique des matériaux dans lesquels elles se trouvent.

Comparativement à celles menées sur les systèmes micro-électromécaniques [Gane and Bowden, 1968], les études expérimentales conduites sur les systèmes nano-électromécaniques (NEMS, pour nano-eletromechanical systems) [Loh and Espinosa, 2012] restent très limitées. Ceci est encore plus vrai dans le cas des nanoparticules, leur taille rendant ces études très difficiles voire impossibles dans certains cas. Cependant, tandis que certains auteurs ont réussi à réaliser des études expérimentales sur des nanoparticules simples et isolées [Gerberich et al., 2003, Deneen et al., 2006, Wagner et al., 2015], permettant d'obtenir une meilleure compréhension de leur comportement mécanique, d'autres auteurs ont préféré recourir à des techniques de simulation numérique [Bian and Wang, 2013, Bian et al., 2014, Feruz and Mordehai, 2016, Salah et al., 2017, Kilymis et al., 2019] telles que la méthode des éléments finis ou la dynamique moléculaire. Même si ces techniques comportent des limites (problèmes liés à la représentativité du matériau, aux conditions aux limites, au coût de calcul ...), elles permettent néanmoins de réduire les coûts liés aux études expérimentales, de faire des études plus complexes ainsi que des analyses plus approfondies permettant d'avoir une meilleure compréhension.

Dans ce qui suit, après avoir présenté dans un premier temps les études expérimentales effectuées sur les nanoparticules isolées, dans un second temps, nous aborderons les études numériques effectuées sur ces matériaux nanométriques et plus particulièrement les travaux sur la compréhension de leurs comportements mécaniques.

Études expérimentales

La quasi-totalité des études expérimentales réalisées sur les nanoparticules isolées (c'est-à-dire, les nanoparticules non incluses dans une matrice) ont été effectuées en s'inspirant des techniques de nano-indentation. Le comportement des matériaux à cette échelle

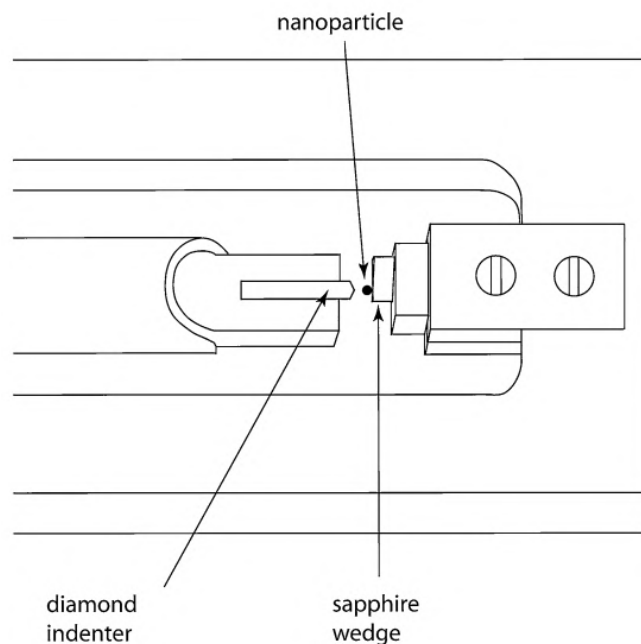


FIGURE 1.4 – *Modèle expérimental pour la compression des nanoparticules [Deneen et al., 2006].*

est souvent différent du comportement observé à l'échelle macroscopique à cause de l'augmentation du rapport surface sur volume. L'équipe de [Gerberich et al., 2003] est sans doute la première qui a réussi à faire des dépositions de nanoparticules de silicium quasi-sphériques sur des substrats de saphir et à réaliser des études de compression en utilisant la technique de la nano-indentation avec un indenteur en diamant (Figure 1.4). Lors de la compression des nanoparticules de silicium, [Gerberich et al., 2003] ont observé la présence de marches sur la courbe de chargement "force-déplacement". Ces marches présents dans la courbe de chargement correspondent à des moments où la nucléation de dislocations est observée (Figure 1.5). Ils ont aussi observé que le déplacement total mesuré lors de la compression était plus important que celui mesuré après la décharge. Ce type de comportement, qu'ils ont appelé déformation plastique réversible, a été expliqué par le fait que les dislocations nucléées lors de la compression, après décharge, retracent partiellement leurs chemins inverses, ce qui se caractérise par une diminution de la déformation totale enregistrée pendant la compression.

Selon le modèle de [Frank and Read Jr, 1950, Fujita and Yamada, 1970], le processus de nucléation et de multiplication de dislocations, pour des matériaux métalliques massifs ayant des grains de taille micrométrique, commence souvent au centre de ces grains et se propagent vers les joints de grains où elles peuvent s'empiler. Pour des matériaux polycristallins ayant des grains de taille ultrafine (proche de l'échelle nanométrique), la

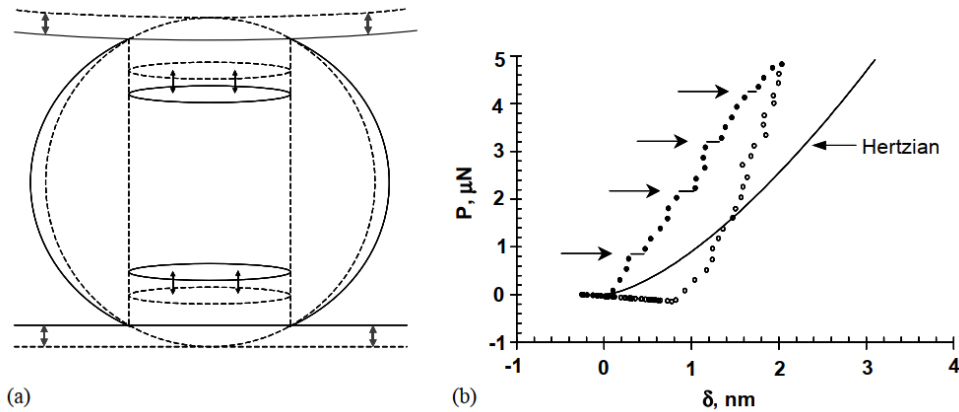


FIGURE 1.5 – (a)-Modèle de nucléation de dislocations proposé, (b)-courbe expérimentale chargement-déplacement [Gerberich et al., 2003].

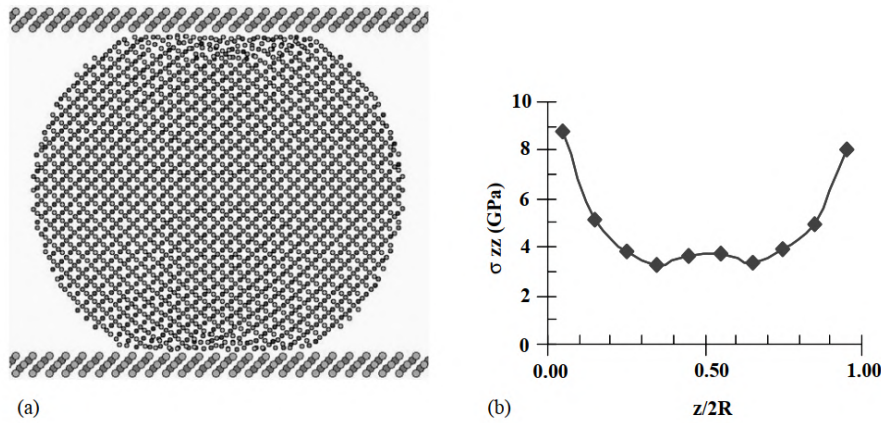


FIGURE 1.6 – (a)-Modèle de compression avec des plaques atomiques, (b)-distribution de la contrainte le long de l'axe de compression [Gerberich et al., 2003].

nucléation de dislocations est rapportée à partir des joints de grains, avec une propagation vers le centre des grains [Li et al., 2021]. Cependant les questions comme « **est ce que, et comment des nanoparticules isolées vont plastifier?** » étaient restés méconnues. À ce sujet, les études expérimentales menées par [Gerberich et al., 2003], couplées avec des simulations de dynamique moléculaire, ont révélé d'importantes informations telles que la concentration de contrainte observée au niveau des zones de contact entre la nanoparticule et l'indenteur pendant la compression. Ils suggèrent ainsi que le début de la plasticité dans les nanoparticules de silicium s'effectue avec la nucléation de dislocations, à partir des zones de contact où la plus grande concentration de contrainte a été notée, et que ces dislocations vont par la suite glisser vers le centre de la nano-sphère en suivant un modèle que l'on peut représenter par un cylindre (Figures 1.5 et 1.6).

Cependant, ces moyens traditionnels utilisés avec la technique de la nano-indentation ont des limites : ils ne permettent pas de connaître, et donc de tenir compte, de certaines caractéristiques

téristiques du nanomatériau, telles que l'orientation cristallographique, la présence ou non de défauts préexistants, etc., lesquelles sont capitales pour une meilleure compréhension du comportement mécanique du matériau étudié.

En 2006, ces limites ont pu être franchies grâce à des études menées par [Deneen et al., 2006]. Ces derniers ont effectué des études de compression in situ sous MET (Microscope Electronique en Transmission) et ont pu caractériser les champs de déformation élastiques et plastiques lors de la compression de nanoparticules de silicium en se basant sur les contrastes observés lors du chargement. En effet, ils ont observé que les contrastes changent selon la structure cristallographique du réseau. Cette sensibilité des contrastes par rapport à la structure du réseau a permis de déterminer les phases élastiques et plastiques lors du chargement. Par conséquent, pendant le chargement, si la déformation reste élastique, les contrastes vont disparaître après le déchargement. En revanche, si la déformation lors du chargement est plastique, les contrastes demeurent dans la nanoparticule après son déchargement (Figure 1.7).

Des tests de compression plus récents, effectués sur des particules de Ni_3Al de taille $300nm$, isolées par extraction électrochimique à partir d'un superalliage à base de nickel, ont montré que le comportement mécanique est sensible à l'état du matériau avant sollicitation. [Schloesser et al., 2011] ont observé des chutes présentes sur les courbes de chargement des particules saines (sans défauts avant chargement) et absentes dans le cas des particules ayant des défauts préexistants. Les chutes observées sur les courbes des particules saines ont été attribuées à de la nucléation de dislocations.

Après ces observations, plusieurs autres études visant à caractériser le comportement mécanique des nanoparticules ont été menées. Certaines questions comme la présence ou non d'effet de taille observé dans les matériaux métalliques massifs se sont posées pour les nanoparticules isolées.

Pour répondre à cette question, [Mordehai et al., 2011] ont effectué des études expérimentales couplées avec des simulations de dynamique moléculaire sur des nanoparticules et des films minces de monocristaux d'or d'épaisseur comparable. Les études expérimentales ont montré que pour un même niveau de déplacement, les films minces se trouvent dans un niveau de chargement plus élevé que celui des nanoparticules. Cette différence a été justifiée par le fait que les films minces contiennent des joints de grains qui bloquent le glissement des dislocations et augmentent par conséquent la résistance du matériau. En revanche, les nanoparticules, étant dépourvus de joints de grains, les dislocations ont la possibilité de s'échapper au niveau des surfaces latérales, ce qui facilite leurs glissements, et qui les rend moins résistantes que les films minces. Ils ont aussi observé que plus la taille

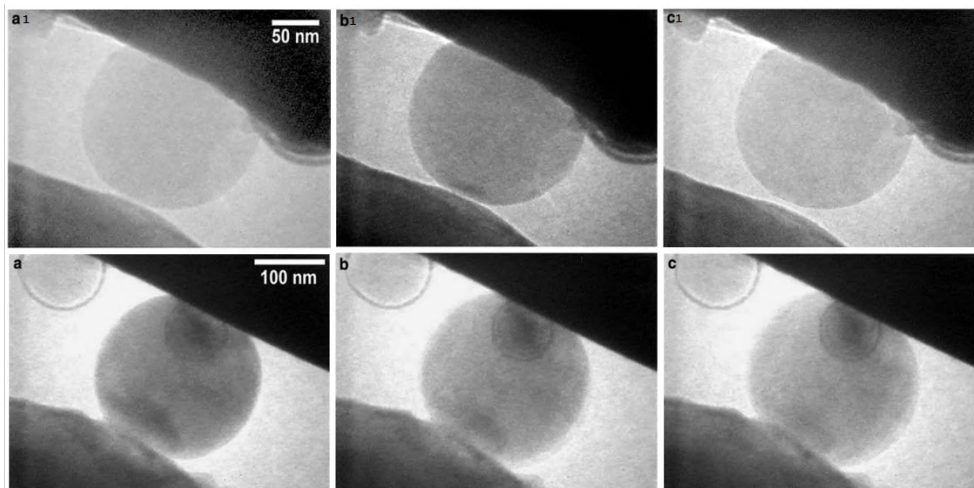


FIGURE 1.7 – Compression de nano-sphères de silicium; en haut : compression élastique (a_1 -avant chargement, b_1 -apparition des contrastes lors du chargement élastique, c_1 -disparition des contrastes après décharge); en bas : compression plastique (a -apparition des contrastes lors du chargement plastique, b -conservation des contrastes après décharge, c -diminution des contrastes malgré l'augmentation du chargement indiquant la rupture de la nano-sphère), [Deneen et al., 2006].

latérale (taille perpendiculaire à l'axe de sollicitation) des nanoparticules augmente, plus elles sont résistantes. Cependant quelle que soit la taille fixée, les nanoparticules vont toujours rester moins résistantes que les films minces de même épaisseur. Selon [Mordehai et al., 2011], cet effet de taille observé dans les nanoparticules est contrôlé par la compétition entre la capacité de la surface latérale à laisser s'échapper les dislocations et sa capacité à les retenir à l'intérieur de la nanoparticule.

Malgré les efforts et avancées effectués dans ce domaine, les études effectuées à ce niveau d'échelle restent en grande partie incomprises. On trouve en effet souvent dans la littérature des résultats qui semblent être contradictoires. Sur des nanoparticules de silicium quasi-sphériques, [Nowak et al., 2010] ont trouvé un effet de taille qui se caractérise par une augmentation de la résistance mécanique avec la diminution du diamètre des nanoparticules (Figure 1.8), tandis que [Wagner et al., 2015], en étudiant le comportement des nano-cubes de silicium, n'ont souligné aucun effet de taille (Figure 1.8). En effectuant des investigations supplémentaires, ces derniers ont observé d'autres mécanismes qui n'étaient pas encore découverts expérimentalement sur des nanoparticules. En effectuant des chargements dans la direction $[-110]$, couplés avec des observations microscopiques, [Wagner et al., 2015] ont observé la formation d'une structure initiant le début de la plasticité au niveau des zones de contact entre le nano-cube et l'indenteur. La formation de cette structure (nommée embryon dans la Figure 1.9) a été attribuée à la distribution hétérogène de la pression qui se caractérise par une concentration de contrainte plus importante au niveau des zones de contact. Pendant les premiers événements plastiques, ils ont assisté à

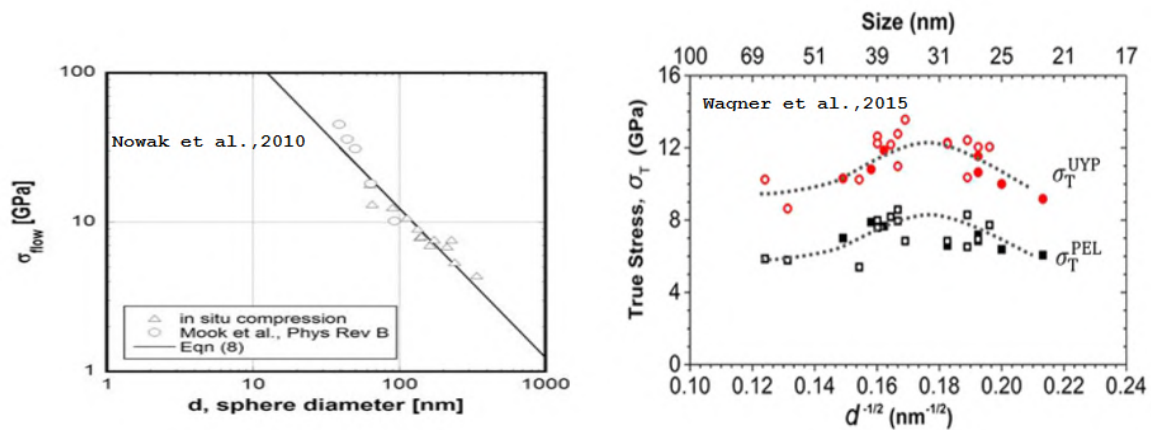


FIGURE 1.8 – Variation de la contrainte en fonction du diamètre de la nanoparticule d'après [Nowak et al., 2010] et [Wagner et al., 2015].

la nucléation et aux glissements de dislocations partielles suivant les plans $\{111\}$ (Figure 1.9).

Même s'il est difficile de réaliser expérimentalement des tests de sollicitation sur des nanoparticules du fait de leur petite taille, des progrès notables ont été effectués dans ce domaine.

Récemment, des tests de compression ont été réalisées sur des particules de nickel facettées, dosées par du cobalt (C_o) par [Bisht et al., 2021]. Les études expérimentales effectuées sur des particules de taille allant de 133nm à 792nm , cumulées avec des simulations atomistiques ont montré qu'au fur et à mesure que le taux de dosage augmente, la résistance mécanique des particules diminue jusqu'à atteindre un minimum, puis augmente ensuite. Cependant, quel que soit le taux de dosage, la résistance mécanique des particules de nickel pur reste supérieure à celle des particules dosées par du cobalt. Ce résultat n'est pas totalement en phase avec les résultats observés sur du nickel massif, dans lequel, la présence de certains éléments comme le cobalt entraîne un effet de durcissement ([Zamani et al., 2016]).

D'autres techniques expérimentales prometteuses, basées sur la diffraction des rayons X (DRX) sont aussi en voie de développement ([Abuin et al., 2019, Atlan et al., 2022, Dupraz et al., 2022]). Ces études révèlent la possibilité de mesurer la distribution de la déformation sur différentes régions d'une particule de platine soumis à différents traitements (avec de l'électrochimie, avec de l'argon- Ar , avec du monoxyde de carbone- CO , avec du dioxygène- O_2 ...).

Cependant, pour apporter des réponses à certaines questions telle que l'existence ou non d'un effet de la forme, de l'orientation cristallographique, etc., tout en se basant sur des

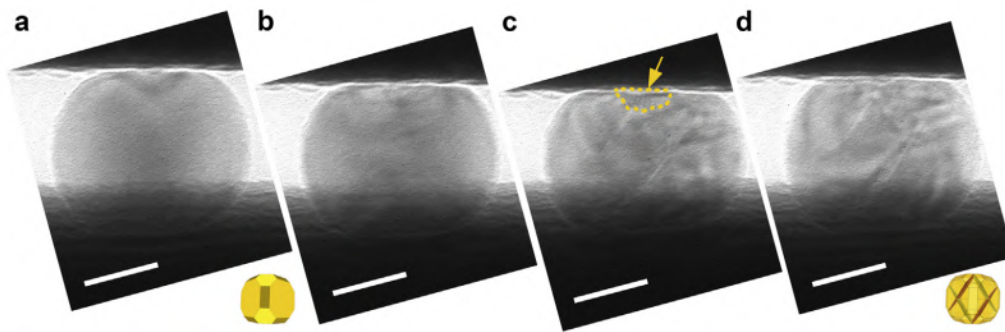


FIGURE 1.9 – Compression de nanoparticule de silicium : (a)-avant chargement, (b)-début de chargement avec apparition de bandes de contrastes, (c)-formation d'un embryon indiqué par la flèche jaune, (d)-bandes de contrastes dans les plans $\{111\}$ [Wagner et al., 2015].

études moins coûteuses, plus approfondies et plus flexibles, une des solutions adoptées est de se tourner vers les études numériques.

Études numériques

La réalisation d'études numériques a l'avantage d'être plus simple et moins coûteuse. Et même si elles peuvent être moins représentatives que les études effectuées expérimentalement, elles constituent des moyens plus souples et plus adaptés à la réalisation d'études paramétriques permettant de conduire des analyses plus approfondies. Car contrairement aux études expérimentales, grâce à la possibilité de faire des visualisations de certaines grandeurs telles que l'analyse de cartes de contraintes et de déformations, ou l'analyse de mécanisme de plasticité, il est possible d'appréhender les mécanismes probables. De plus, l'outil numérique peut venir en appui de l'analyse des résultats expérimentaux qui peuvent être difficile à appréhender. Néanmoins pour avoir une bonne représentativité des résultats numériques, il faut nécessairement s'approcher au mieux de manière quantitative et qualitative des études expérimentales, la petite taille des nanoparticules donnent lieu à des géométries ne permettant que la caractérisation expérimentale du comportement mécanique par des essais de compression.

Numériquement, pour se référer aux études expérimentales, les nanoparticules sont souvent comprimées entre deux plaques rigides virtuelles et de taille infinie comparée à la taille de la nanoparticule (Figure 1.10).

Contrairement aux matériaux massifs, où les propriétés de volume dominent sur les propriétés de surface, les nanoparticules ont un rapport de surface/volume très élevé qui fait que le comportement mécanique est en grande partie piloté par les propriétés de surface. Le début des mécanismes de plasticité pour une nanoparticule est d'ailleurs souvent marqué par la nucléation de dislocations à partir de la surface.

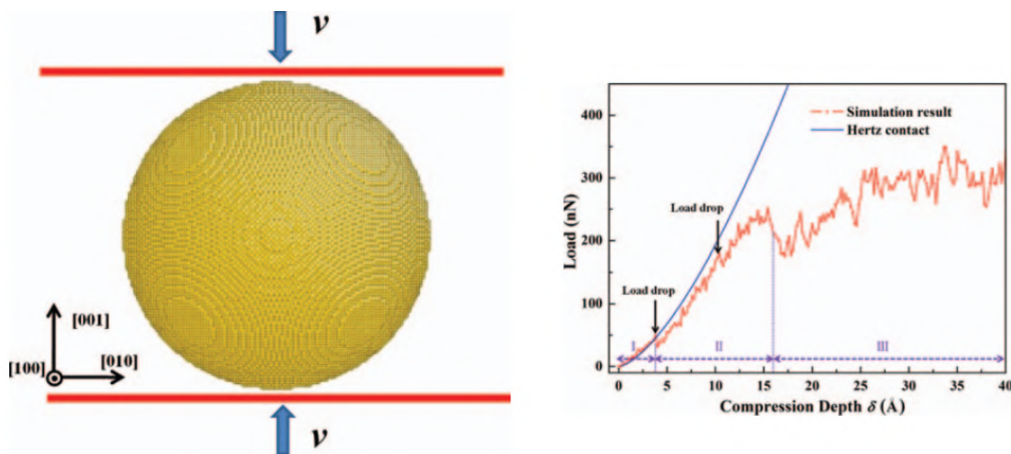


FIGURE 1.10 – Test de compression effectué sur une nanoparticule de cuivre : modèle de chargement avec des plaques de compression virtuelles (gauche), courbe chargement-déplacement avec une vitesse de chargement de 10m/s à une température de 10K (droite), [Bian and Wang, 2013].

Les premières études numériques effectuées grâce à des calculs de dynamique moléculaire ont permis d'avoir une vision plus claire du comportement mécanique des nanoparticules dans divers matériaux. Certaines propriétés du matériau sont ainsi estimés directement par analyse des courbes de chargement.

En 2013, [Bian and Wang, 2013] ont utilisé la technique de dynamique moléculaire pour étudier le comportement mécanique des nano-sphères de cuivre de diamètre 20nm en effectuant des études de compression dans la direction $[100]$. L'étude du comportement élastique du matériau a montré que le modèle de contact hertzien classique utilisé en mécanique des milieux continus donne une bonne représentation de la partie élastique et a permis d'avoir une estimation du module de Young du matériau (Figure 1.10). Les premiers événements plastiques sont marqués par la nucléation de dislocations dans les zones de contact (les mêmes sites que ceux observés expérimentalement [Deneen et al., 2006]). Ce début de plasticité selon [Bian and Wang, 2013] est marqué par la génération de dislocations partielles de Shockley (dislocations ayant des vecteurs de Burgers de type $1/6 \langle 112 \rangle$) qui s'interceptent pour donner naissance à la formation d'une première pyramide suivie d'une seconde qui est formée par des dislocations ayant des vecteurs de Burgers de type $1/3 \langle 100 \rangle$. Avec l'augmentation du taux de compression, on assiste à la destruction de la seconde puis de la première pyramide par dissociation des dislocations qui vont glisser vers le centre de la nanoparticule. [Bian and Wang, 2013] ont aussi remarqué la mise en place d'un mode de déformation par maillage au fur et à mesure que le taux de compression augmente. Si, au début de la plasticité, le mécanisme de plasticité est uniquement piloté par du glissement de dislocations partielles, la déformation par maillage est observée pour des taux de chargements plus élevés (Figure 1.11). De plus, d'après [Bian

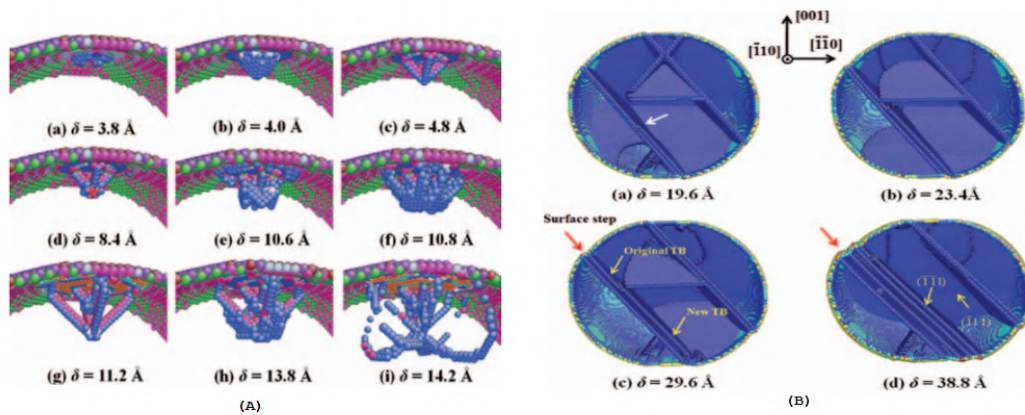


FIGURE 1.11 – Mécanisme de plasticité : (A)-déformation plastique par glissement de dislocations, (B)-déformation plastique par maclage [Bian and Wang, 2013].

and Wang, 2013], si la taille de la nanoparticule devient inférieure à 13nm , on n’assistera plus à la formation de la seconde pyramide observée au début de la plasticité. Ceci est dû au fait que les couches extérieures ont des tailles similaires et que par conséquent, la première pyramide formée empêche la formation de la seconde. Ces changements de géométrie de surface observés lors de la variation de la taille des nanoparticules ont fait l’objet d’autres études. Des études numériques en dynamique moléculaire, complétées avec une approche en éléments finis sur le comportement élastique des nano-sphères de cuivre, ont montré que selon la taille de la nanoparticule, le modèle théorique de contact utilisé pour bien représenter le comportement du matériau peut être différent [Wang et al., 2014b]. En effet ces derniers ont montré que le modèle de contact hertzien représente bien le comportement élastique si la taille de la nano-sphère est assez grande pour que l’effet des marches de surface soit fortement diminué. Cependant, si la taille des nanoparticules diminue, l’effet des marches de surface peut devenir non négligeable et dans ce cas le modèle de contact à poinçon plat va mieux représenter le comportement élastique que le modèle hertzien.

La discussion sur la question de l’existence ou non d’un effet de taille dans les nanoparticules observé dans les études expérimentales a aussi fait l’objet de plusieurs discussions sur les études numériques conduites. En effet, si certaines études ont souligné l’existence d’un effet de taille, d’autres développent une analyse quelque peu différente. [Feruz and Mordehai, 2016], dans le cadre d’une étude en dynamique moléculaire effectuée sur des nanoparticules d’or en forme de polyèdre de Wulff, ont souligné un effet de taille portant sur la limite d’élasticité (augmentation de la limite d’élasticité avec la diminution de la taille de la nanoparticule) et absent sur le module d’élasticité (Figure 1.12). Cet effet de taille observé a été lié à la méthode de nucléation au début de la plasticité qui est fonction

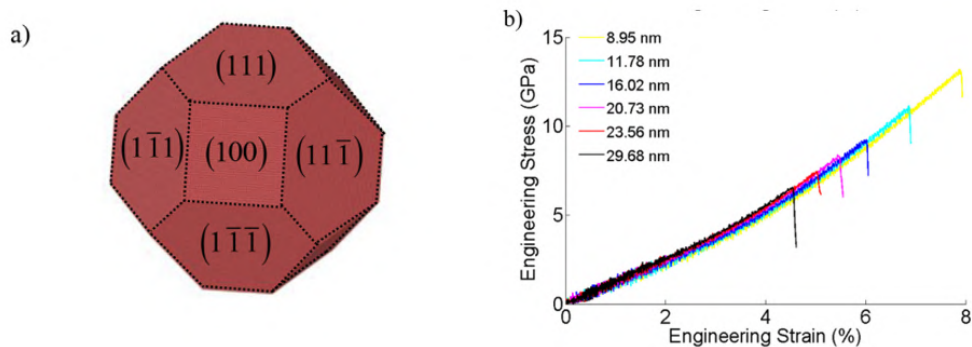


FIGURE 1.12 – (a)-nanoparticule d'or en forme de polyèdre de Wulff, (b)-variation de la limite d'élasticité en fonction de la taille de la nanoparticule [Feruz and Mordehai, 2016].

de la taille. En 2017, [Salah et al., 2017], dans une étude sur des nano-sphères d'aluminium (matériau ayant la même structure cristallographique que l'or), ont montré que l'effet observé sur le comportement mécanique des nanoparticules et lié à la taille, est en fait plutôt dû à un effet de géométrie de surface. Ces derniers soutiennent que la géométrie de surface, et plus particulièrement l'organisation des plans atomiques qui sont en contact avec les plaques de compression, a une influence non négligeable sur les premiers événements de plasticité. En faisant des calculs de dynamique moléculaire sur des nanoparticules de tailles différentes, [Salah et al., 2017] ont enregistré un écart sur la limite d'élasticité plus important entre les nanoparticules de tailles très proches (20.17nm et 20.01nm) qu'entre les particules de tailles très différentes (20.01nm et 4.01nm) (Figure 1.13 (A) et (B)). Cette observation a été justifiée par le fait qu'en modifiant un tant soit peu la taille de la nanoparticule, on peut ajouter ou supprimer des atomes au niveau des couches atomiques externes. Ceci se traduit par une modification de la géométrie de surface externe, qui s'accompagne d'un changement des points de concentration de contrainte (Figure 1.13 (a, b, c)). Ces changements sur les surfaces de contact et sur les points de concentration de contrainte, vont entraîner une modification de la limite d'élasticité. Les premières études expérimentales et numériques conduites sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées ont toutes montrées que le début du mécanisme de plasticité est gouverné par la nucléation de dislocations à partir de la surface de la nanoparticule. [Amodeo and Lizoul, 2017], dans une étude en dynamique moléculaire dédiée à l'étude de l'effet de la forme sur le comportement mécanique des nano-cubes et nano-cubes arrondis de Ni_3Al , ont montré qu'en fonction du taux d'arrondissement des nano-cubes, d'autres sites de nucléations pouvaient être activés. Avec un paramètre d'arrondissement variable, plusieurs tests de compression ont été conduits sur des cubes arrondis de même taille caractéristique. Ils ont montré qu'au fur et à mesure que les cubes sont arrondis, on assiste à une

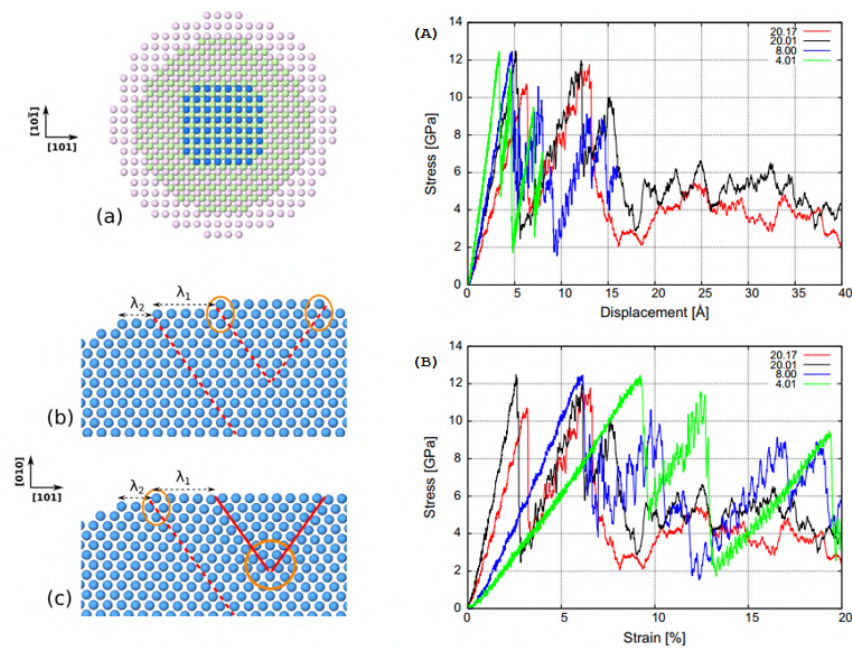


FIGURE 1.13 – (a)-structure de la surface externe d’une nano-sphère d’aluminium, (b-c)-localisation de la contrainte au cours du chargement en fonction de la longueur des marches λ , (A-B)-courbes de chargements, [Salah et al., 2017].

diminution de la force de compression ainsi qu’à une augmentation du module et de la limite d’élasticité (Figure 1.14). Lors de leurs études, [Amodeo and Lizoul, 2017] n’ont souligné aucun effet de taille et les variations observées sur le comportement mécanique en fonction de l’arrondissement des nano-cubes ont été attribuées à un effet de géométrie de surface. En effet, avec l’arrondissement des nano-cubes, il se produit une diminution à la fois de la force et de la surface de contact. La diminution de la surface de contact entraîne une augmentation du module et de la limite d’élasticité. [Amodeo and Lizoul, 2017] ont aussi montré qu’à partir d’un certain coefficient d’arrondissement, on peut assister à une modification du mode de déformation. En effet le mécanisme de plasticité des nano-cubes, qui est marqué par un mode de déformation hétérogène commençant avec de la nucléation de dislocations partielles de Shockley au niveau des coins, peut basculer vers un mode de déformation homogène marqué par la nucléation de dislocations partielles commençant au centre de la nanoparticule. L’analyse des cartes de contrainte ont montré que lors de cette phase de transition (changement de mode de déformation), il apparaît une concentration de contrainte au centre des nano-cubes arrondis contrairement aux nano-cubes parfaits où les concentrations de contrainte sont observées seulement au niveau des coins (Figure 1.15).

Ainsi il a été montré que les propriétés élastiques, de même que le début de la plasticité, sont souvent gouvernés par la géométrie de la surface en contact avec les plaques de char-

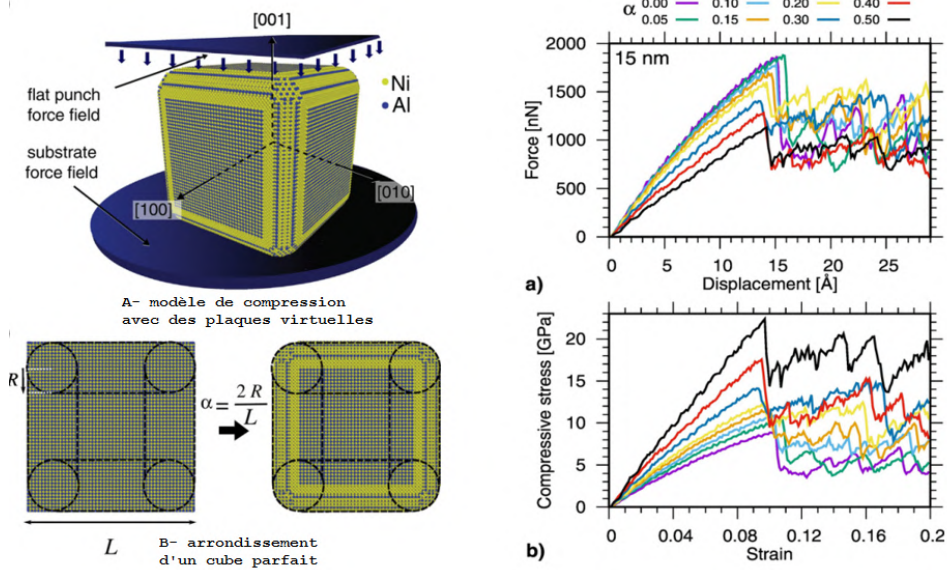


FIGURE 1.14 – Modèle de compression et arrondissement de cubes parfaits de Ni_3Al (gauche), courbes de chargement (droite) [Amodeo and Lizoul, 2017].

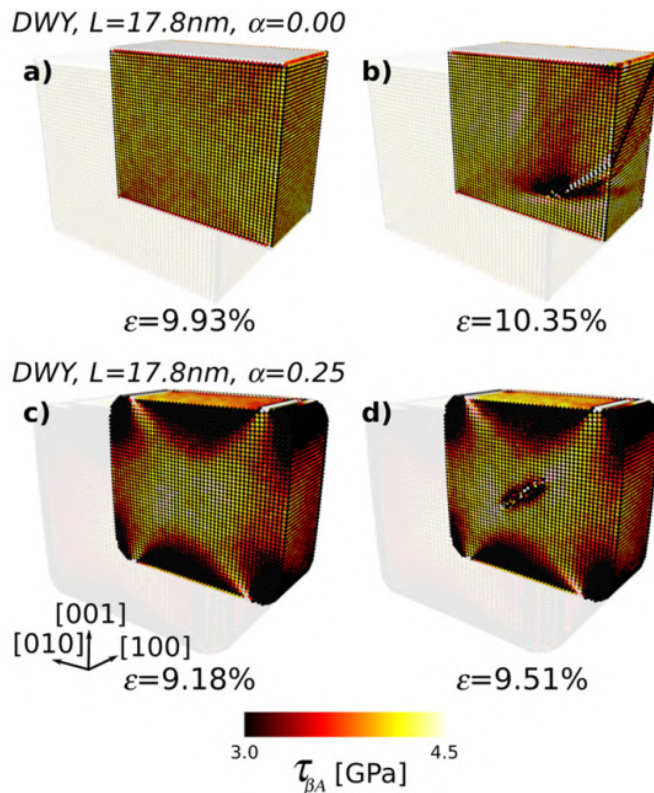


FIGURE 1.15 – (a-b)-cube parfait et concentration de contrainte au niveau des coins, (c-b)-cube arrondi et concentration de contrainte au niveau du centre [Amodeo and Lizoul, 2017].

gement. La variation de la géométrie de surface peut être due à une variation de la taille du nanomatériau pour certaines formes (sphères, polyèdres de Wulff ...). Le comportement mécanique change alors lorsque l'on fait varier la taille de la nanoparticule. [Kilymis et al.,

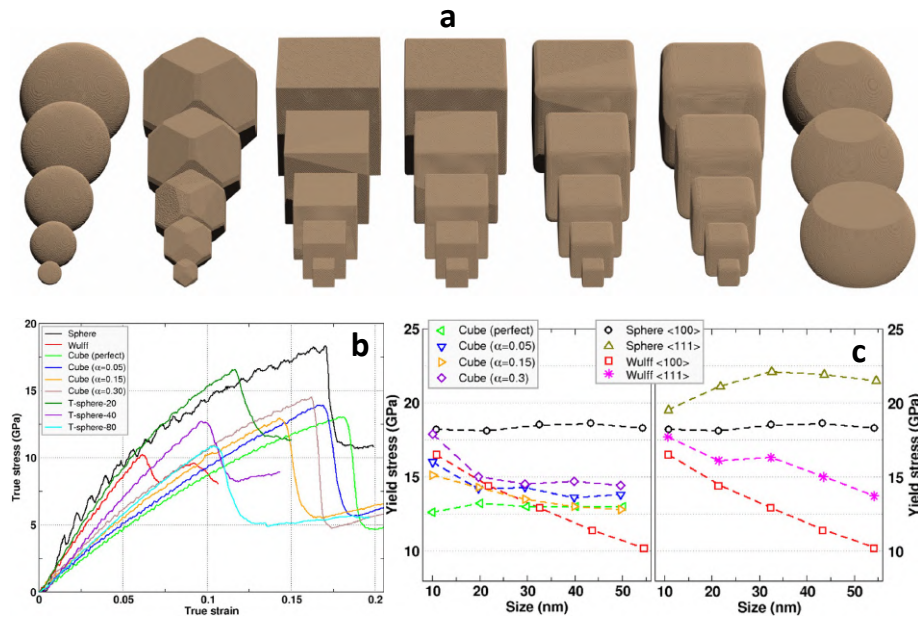


FIGURE 1.16 – (a)-formes utilisées pour la compression, (b)-courbe de chargement contrainte-déformation, (c)-variation de limite d'élasticité en fonction de la taille [Kilymis et al., 2018].

2018] ont effectué des études approfondies sur l'effet de la forme en modélisant diverses géométries et ont montré que les mécanismes de plasticité sont gouvernés par la localisation de la contrainte de cisaillement construite pendant le chargement élastique, et selon la géométrie de surface. Ces deux propriétés sont liées à la forme de la nanoparticule. En effectuant des tests de compression sur des nanoparticules de formes différentes, [Kilymis et al., 2018] ont observé un effet de taille présent dans les polyèdres de Wulff mais absent dans les nano-sphères et les nano-cubes (Figure 1.16). Ils en déduisent ainsi que même s'il y a un effet de taille, ce dernier est piloté par la forme de la nanoparticule.

Une autre question très importante dans l'établissement du comportement mécanique des matériaux est celle de l'impact de l'orientation cristallographique sur le comportement mécanique des nanoparticules. Sur un matériau massif, des études ont montré que l'orientation cristallographique du matériau par rapport à l'axe de chargement a un effet non négligeable sur le comportement mécanique [Vattré et al., 2010, Yanqiu et al., 2020].

Sur des nanoparticules de niobium, [Bian et al., 2018a] ont montré que le comportement élastique varie en fonction de l'orientation cristallographique. Selon l'orientation cristallographique du matériau par rapport à l'orientation de l'axe de sollicitation, le modèle théorique utilisé pour l'estimation du comportement peut varier. Il a été observé que si le modèle hertzien représente mieux le comportement élastique dans les directions [111] et [001], dans la direction [110], le modèle à poinçon plat est mieux adapté. Concernant le compor-

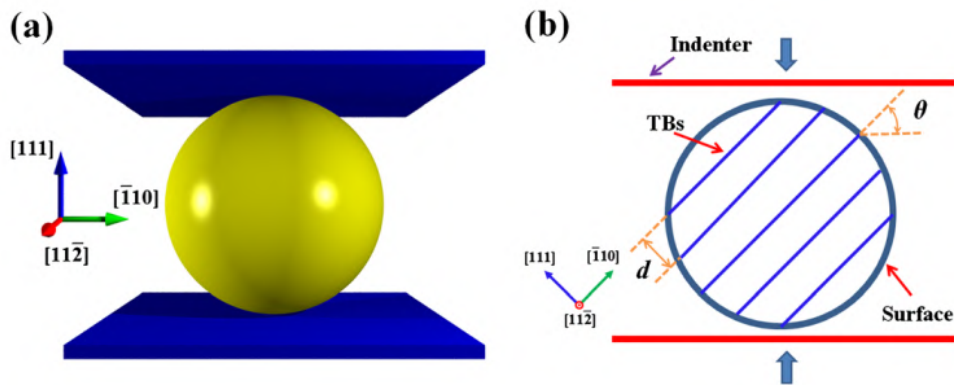


FIGURE 1.17 – Compression de nano-sphères de cuivre après introduction de joints de macles : (a)-modèle de compression avec les plaques virtuelles, (b)-représentation des joints de macles avec la direction de compression [Bian et al., 2014].

tement plastique, les modes de déformations qui sont observés diffèrent selon l'orientation cristallographique. La déformation par glissement de dislocations domine dans la direction $[110]$, alors que celle par maclage prend le dessus dans la direction $[111]$. Ces deux modes de déformation coexistent dans la direction $[001]$. Sur une gamme de matériaux plus large (Al, Cu et Ni), [Salah, 2018] a montré que l'orientation cristallographique de la nanoparticule a des conséquences à la fois sur le module d'élasticité, la limite d'élasticité et le mécanisme de plasticité. Par exemple, sur les nanoparticules d'aluminium, si dans les directions $[123]$, $[010]$ et $[111]$, le mécanisme de plasticité est gouverné par du glissement de dislocations, dans la direction $[211]$, le mécanisme est entièrement piloté par du maclage. Dans la direction $[210]$, on retrouve la coexistence des deux modes de déformation. Dans le cas de nanoparticules de cuivre ou de nickel, les mécanismes de plasticité dans la direction $[111]$ sont gouvernés par du glissement de dislocations. Mais, dans les directions $[010]$ et $[211]$, pour les deux matériaux, le mode de déformation par maclage pilote le mécanisme de plasticité. Ceci montre que la géométrie locale observée dans certains directions (la direction $[211]$ par exemple) peut avoir un impact plus important que l'effet du matériau lui-même.

D'autres études visant à caractériser le comportement mécanique des nanoparticules en présence de certains défauts surfaciques (macles, interface ...) ont été également effectuées. [Bian et al., 2014] ont introduit des joints de macles dans des nano-sphères de cuivre de 30nm de diamètre et ont effectué des tests de compression suivant plusieurs directions (Figure 1.17). Il apparaît que les joints de macle peuvent constituer des obstacles pour le glissement des dislocations entraînant un durcissement du matériau. De plus, lorsque l'espacement entre les joints de macles diminue, la limite d'élasticité de même que l'énergie de déformation augmentent (Figure 1.18). Par ailleurs, pour comprendre l'impact qu'une

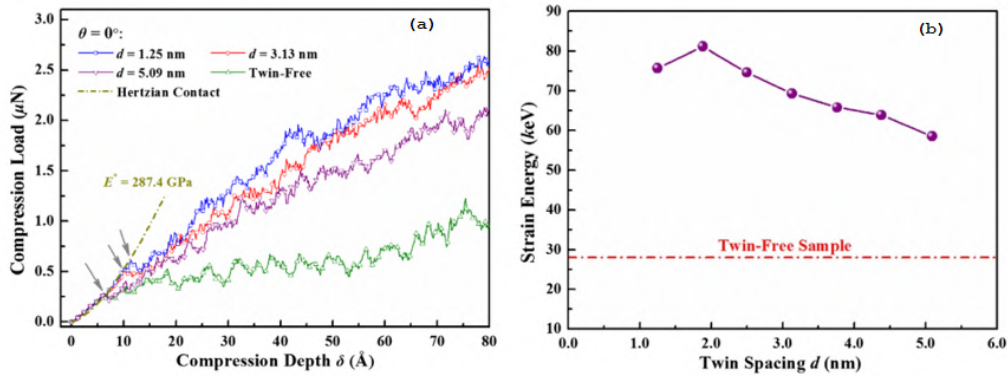


FIGURE 1.18 – Variation de la limite d'élasticité (gauche) et de l'énergie de déformation (droite) en fonction de l'espacement entre les joints de macles [Bian et al., 2014].

interface peut avoir sur le comportement mécanique d'un nanoparticule, [Kilymis et al., 2019] ont modélisé des nanoparticules architecturées qui sont composées de deux phases (un coeur en silicium et une coquille en carbure de silicium) $Si - SiC$. Deux types d'interfaces ont été considérés, à savoir une interface amorphe et une interface cohérente. Des réponses similaires ont alors été observées sur les comportements mécaniques obtenus, indépendamment de la nature de l'interface (Figure 1.19 (a), (b) et (c)). L'étude de l'évolution des comportements mécaniques de différentes architectures pendant la compression a montré une dépendance du comportement de la nanoparticule architecturée par rapport au ratio taille du coeur/taille de la coquille (Figure 1.19 (d) et (e)). De plus, l'analyse des cartes de contrainte et des débuts de mécanisme de plasticité a montré qu'en fonction du ratio taille du coeur/taille de la coquille, l'observation des premiers événements plastiques, marqués par la nucléation de dislocations partielles, peut avoir lieu au niveau du coeur ou au niveau de la coquille. Pour une nanoparticule de 50 nm de diamètre, par exemple, il a été observé que lorsque l'épaisseur de la coquille est inférieure à 5 nm , l'interface se comporte comme un site de nucléation de dislocations. Ces dernières vont par la suite se propager dans le coeur. En revanche, avec une épaisseur de 12.5 nm , les premiers événements de plasticité sont marqués par de la nucléation de dislocations à partir de la surface en contact avec les indenteurs (Figure 1.20).

Ces types d'études permettent d'avoir une meilleure compréhension de l'influence que peut avoir certains types de défauts sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées, mais font aussi naître de nouvelles questions plus complexes telles que les questions des effets de taille ou de forme en présence d'une interface ou d'un autre type de défaut.

L'ensemble de ces études a permis de mieux comprendre le comportement mécanique d'une nanoparticule isolée par rapport à celui d'un matériau massif. L'analyse qualitative

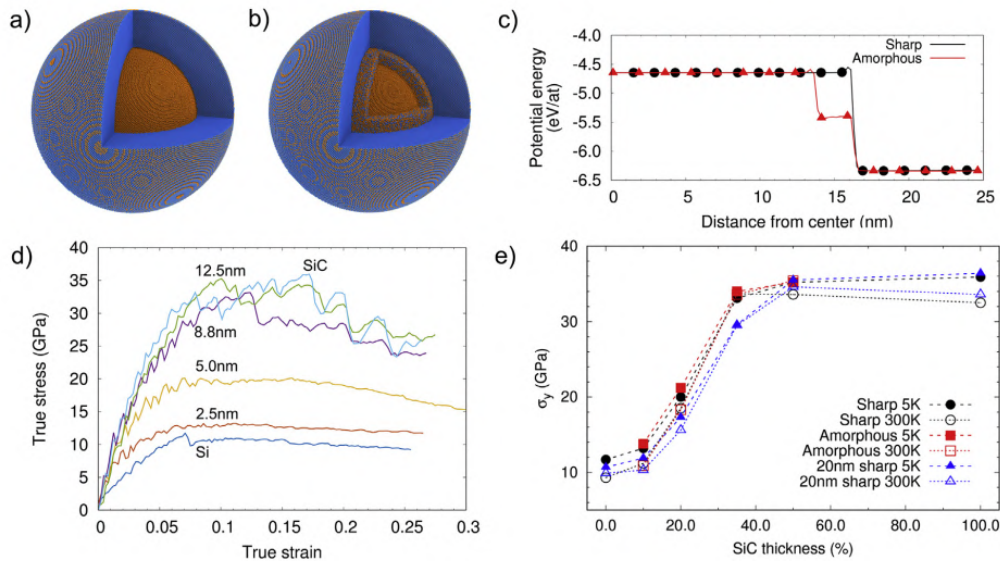


FIGURE 1.19 – Compression de nanoparticules architecturées : (a)-interface cohérente, (b)-interface amorphe, (c)-variation de l'énergie potentielle à partir du centre de la nanoparticule jusqu'à la surface externe, (d)-courbe de chargement, (e)-variation de la limite d'élasticité en fonction de l'épaisseur de la coquille [Kilymis et al., 2019].

des résultats des études numériques montre des comportements semblables à ceux observés expérimentalement, mêmes si peu d'études expérimentales ont été réalisées; la taille des nanoparticules rendant très difficiles ces investigations.

Une question non adressée à ce jour conditionne potentiellement l'ensemble des résultats obtenus numériquement à ce jour : l'impact de la mise-en-œuvre du chargement sur leur comportement mécanique obtenu. En effet, comme la forme de la nanoparticule peut avoir un impact considérable sur leur comportement mécanique [Salah et al., 2017, Amodeo and Lizoul, 2017, Kilymis et al., 2018], et que l'interaction entre la nanoparticule et les moyens de chargement (champ de force) se passe à la surface de la nanoparticule, on ne peut pas conclure en se basant simplement sur la forme de la nanoparticule et les mécanisme observés, car la mise-en-œuvre du chargement peut influencer sur le comportement. Pour répondre à cette interrogation, une étude effectuée sur des nanoparticules isolées d'aluminium et de nickel est présentée au chapitre 2 (section 2).

Si toutes ces investigations ont permis d'obtenir des avancées notables sur la compréhension du comportement mécanique des nanoparticules isolées, tant d'un point de vue expérimental que numérique, celui d'une nanoparticule incluse dans une matrice reste moins compris. Les nanoparticules métalliques sont souvent retrouvées comme renforts dans les alliages métalliques (précipités/inclusions). Dans le cadre de notre étude, un fo-

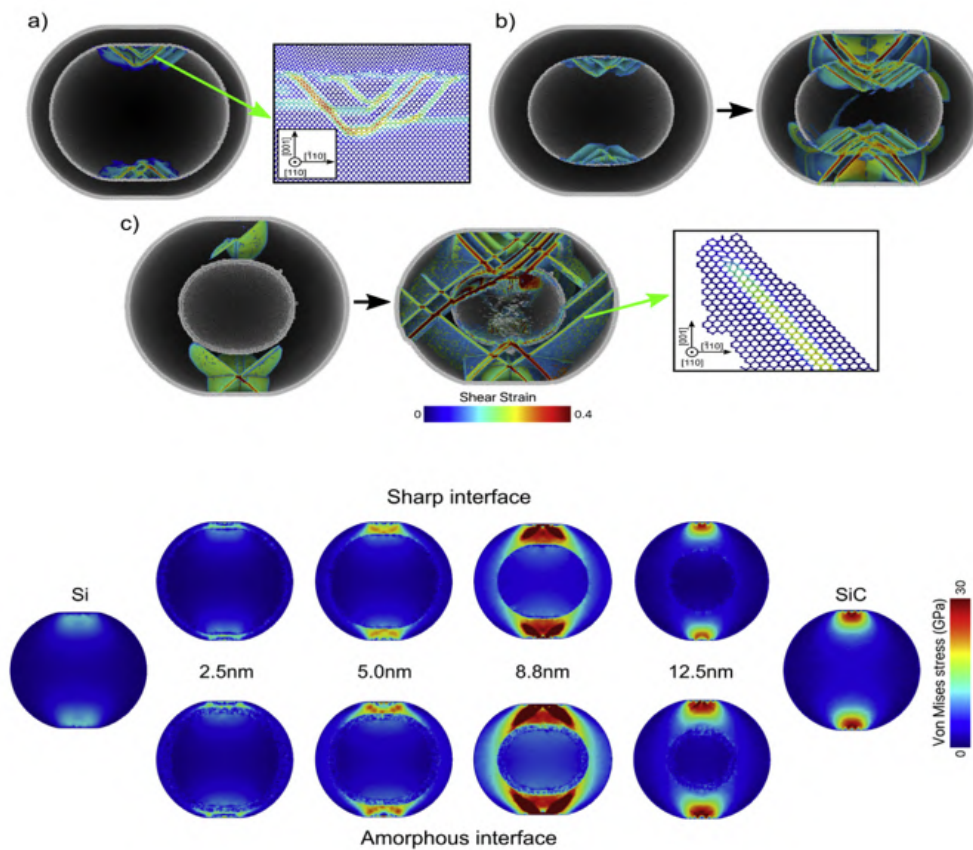


FIGURE 1.20 – En haut : (a-b)-Déclenchement et évolution du mécanisme de plasticité à partir du cœur, (c)-Déclenchement et évolution à partir de la coquille. En bas : distribution de la contrainte en fonction du ratio cœur/coque [Kilymis et al., 2019].

cus est porté sur le comportement mécanique des superalliages base nickel dans lesquels ces précipités sont présents et ont rôle essentiel.

LES SUPERALLIAGES BASE NICKEL : PROPRIÉTÉS ET COMPORTEMENT MÉCANIQUE

Les superalliages base nickel sont largement utilisés dans plusieurs domaines tels que l'aérospatial et le nucléaire [Reed, 2006, Zhang et al., 2014, Fecht and Furrer, 2000] grâce à leurs très bonnes propriétés mécaniques (bonne résistance à la sollicitation mécanique et au fluage, bonne résistance à la corrosion ...) à des températures élevées.

Dans le domaine de l'aéronautique, ces matériaux jouent, par exemple, un rôle important dans la résistance mécanique des aubes de turbine où le matériau subit différents types de sollicitations (thermique, mécanique etc.) [Caron and Lavigne, 2011].

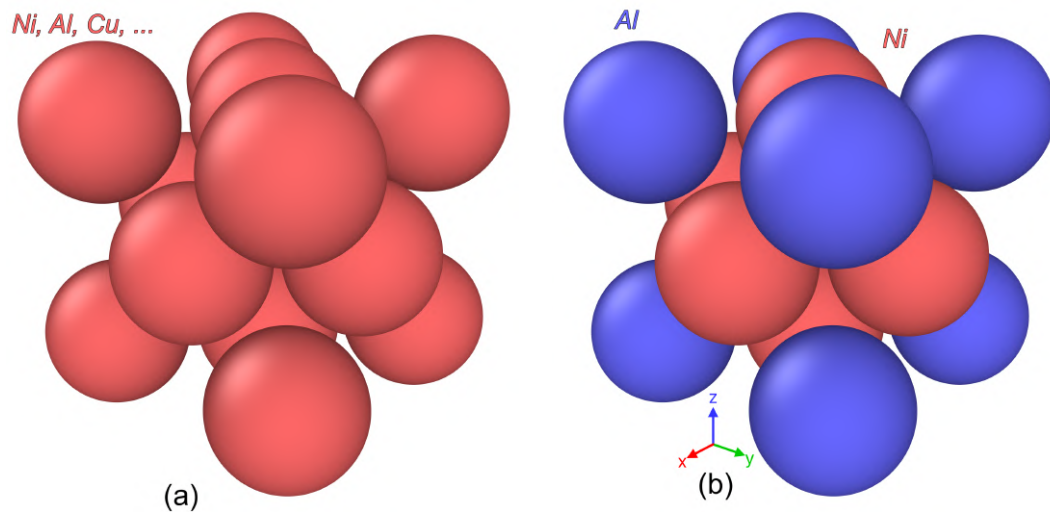


FIGURE 1.21 – (a) - Structure cristallographique de type cubique face centrée (CFC), typique d'un matériau comme Ni, Al, Cu, etc. (b) - Structure cristallographique de type $L1_2$, typique du précipité Ni_3Al (atomes de Ni en saumon et d'Al en bleu).

Organisation de la microstructure

Si les superalliages base nickel sont connus pour leurs propriétés exceptionnelles, c'est sans doute grâce à l'organisation de leur microstructure. Celle-ci est constituée principalement de deux phases.

- La phase γ : elle est désordonnée et a une structure cristallographique cubique à faces centrées (CFC). Elle est formée majoritairement de nickel (Figure 1.21, (a)) mais peut être durcie par d'autres éléments (Cr, Mo, W ...) selon le type d'alliage.
- La phase γ' : la structure de cette phase dite de type $L1_2$ est similaire à celle d'un CFC sauf que les types d'atomes qui occupent les sommets du cube et ceux occupant les centres des faces du cube sont chimiquement différents. Contrairement à la phase γ , cette phase γ' est ordonnée avec une stœchiométrie proche de A_3B (avec $A = Cu, Ni \dots$ et $B = Al, Ti \dots$) (Figure 1.21 (b)).

Pour la production du superalliage poly ou monocristallin, différents types de traitement peuvent être adoptés.

Les superalliages polycristallins largement utilisés dans la fabrication de disques de turbine au niveau des turboréacteurs [Reed, 2006, Pollock and Tin, 2006], où le matériau est soumis à des sollicitations mécaniques et thermiques élevées sont obtenus après plusieurs étapes de traitements mécaniques et thermiques (traitements d'homogénéisations,

forgeage du disque, mise en solution, revenus ...) [Nicolay, 2019]. Les caractéristiques de la microstructure sont contrôlées en grande partie pendant les étapes de traitement thermiques (mise en solution, refroidissement, revenu ...). Par exemple, la taille des grains de même que la distribution des précipités dans la phase γ sont contrôlées pendant les étapes de mise en solution (pendant laquelle une partie ou tous les précipités sont dissouts [Wlodek et al., 1996, Masoumi et al., 2016]) et de refroidissement (pendant laquelle la population de précipités se forme [Radis et al., 2009, Singh et al., 2013]). Le nombre, de même que la taille des précipités formés dépendent fortement de la vitesse de refroidissement. Plus la vitesse de refroidissement est lente, plus des précipités de grande taille se forment, mais moins leurs nombre par unité de volume sera élevé [Ricks et al., 1983, Grosdidier et al., 1998].

L'étape de revenu, où la température du matériau est maintenue à un niveau inférieur à la température de solvus (température à partir de laquelle la phase γ' commence à se dissoudre), est aussi une étape très importante. Pendant cette étape, qui dépend de la température fixée et du temps de traitement thermique, la microstructure du matériau doit tendre vers un équilibre thermodynamique où certaines propriétés souhaitées (la fraction volumique, la composition chimique ...) sont atteintes. La Figure 1.22 montre l'exemple typique d'une microstructure polycristalline de superalliage base nickel obtenue après traitement thermique. Dans cette figure, nous pouvons distinguer la phase γ dans laquelle baignent principalement trois types de précipités γ' durcissants :

- les précipités γ' -primaires intergranulaires, de taille micrométrique sont souvent incohérents avec la matrice ;
- les précipités γ' -secondaires, de taille comprise entre 50nm et 300nm, situés à l'intérieur des grains, sont plutôt cohérents avec la matrice ;
- les précipités γ' -tertiaires, situés aux alentours des joints de grains, entre les précipités γ' -secondaires ou aux alentours des précipités γ' -primaires, sont de taille nanométriques.

Plusieurs générations de superalliages base nickel polycristallins tels que l'Inconel 718, les superalliages Waspaloy et AD730TM, Rene 65 ... [Zhang et al., 2015, Wosik et al., 2001, Devaux et al., 2014, Groh et al., 2014] ont été développés au fil du temps dans le but d'améliorer les propriétés thermomécaniques de ces superalliages base nickel utilisés dans

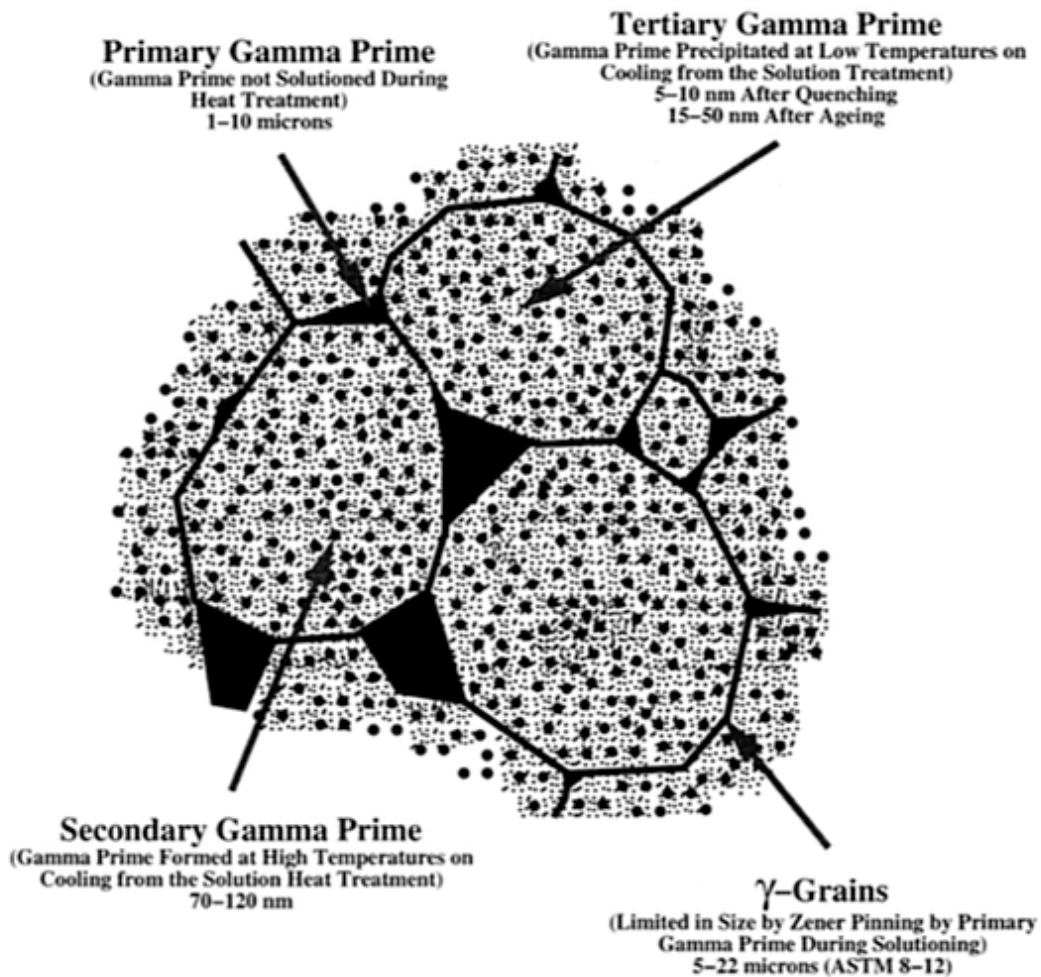


FIGURE 1.22 – Exemple typique d'une microstructure polycristalline d'un superalliage base nickel [Jackson and Reed, 1997].

la construction des disques de turbines afin d'être en phase avec les demandes des motoristes. Dans les aubes de turbine, les températures de fonctionnement sont souvent très élevées (entre 900°C et 1150°C). Dans de telles conditions, certains éléments comme le carbone, le bore, le zirconium ... sont souvent ajoutés dans les superalliages polycristallins afin de renforcer les joints de grains. Ainsi, pour permettre la suppression de ces éléments tout en évitant les problèmes de glissement et de fissuration au niveau des joints de grains qui peuvent réduire la durée de vie du matériau, les superalliages base nickel monocristallins sont utilisés. Ces types de superalliage, utilisés dans la fabrication des pièces utilisées au niveau des aubes de turbine avec la technique de la fonderie en cire perdue dans un four de solidification dirigée [Versnyder and Shank, 1970, Zhao et al., 2010], sont souvent produits de manière préférentielle selon une direction $\langle 001 \rangle$ avec un sélecteur de grain ou germe monocristallin. Bien que le module de Young du matériau soit moins élevé dans

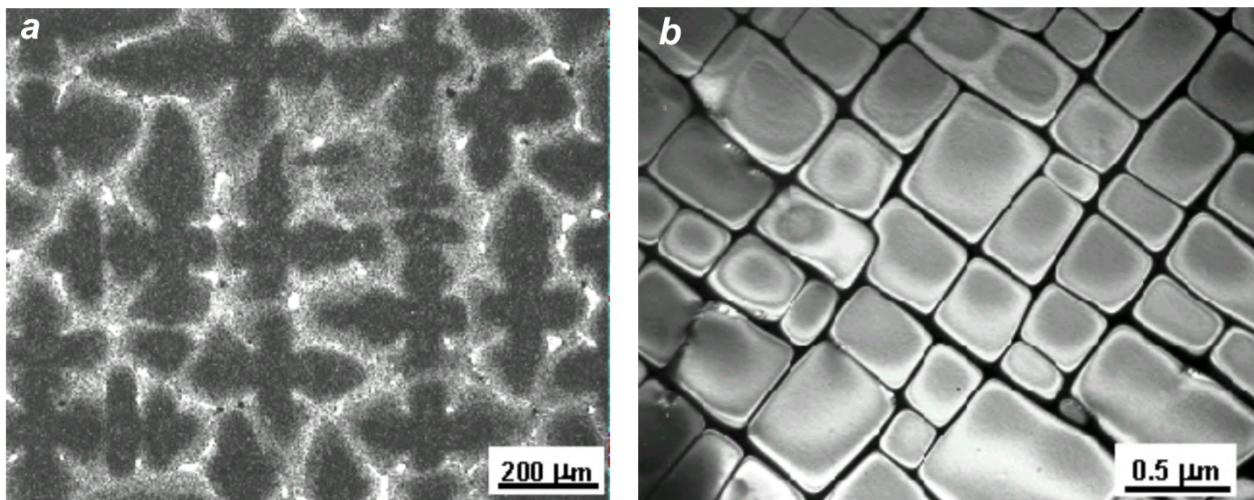


FIGURE 1.23 – (a) - Structure dendritique observée dans une coupe transversale après solidification monocristalline du superalliage AM3, (b) - Structure obtenue après les étapes de traitement thermique d'homogénéisation et de revenu du superalliage monocristallin AM3 [Caron, 2016]).

cette direction, cette dernière permet d'avoir les caractéristiques les plus appropriées en terme d'équilibre lors des sollicitations en fatigue, en fluage et en traction [Zhang et al., 2019]. On obtient ainsi, après croissance, une structure dendritique (cf. Figure 1.23a). Cette structure dendritique va subir par la suite un certain nombre de traitements thermiques (homogénéisation, revenu ...) pour donner naissance à une microstructure composée d'une phase γ , qui est une solution solide à base de nickel comportant des phase γ' ordonnées de types $Ni_3(Al, Ti \dots)$ et ayant des formes cuboïdes (Figure 1.23b). De la même manière que les superalliages polycristallins, pour garantir une bonne résistance mécanique à des températures de fonctionnement qui ne cessent d'augmenter, plusieurs générations de superalliages monocristallins ont été développées au fil du temps. Les superalliages monocristallins de première génération (René N4, CMSX-2, AM1, M88-2, AM3 ...) ont pratiquement les mêmes composants chimiques que les superalliages polycristallins, mais avec un taux d'éléments réfractaires (molybdène-Mo, tantale-Ta, tungstène-W ...) plus élevé [Ross and O'Hara, 1996, Harris et al., 1993]. Avec l'ajout de l'élément rhénium (Re) à des taux de concentration proches de 3% naissent les superalliages monocristallins de 2ème génération (CMX4, PWA-1488, René N5 ...) [Harris et al., 1993, Celed and Duhal, 1988, Wukusick, 2000]. L'impact de cet élément a permis d'avoir un gain de température de fonctionnement de l'ordre de 30K. Pour augmenter la stabilité morphologique de la microstructure γ'/γ à des températures de fonctionnement élevées, la concentration massique de cet élément réfractaire (Re) est augmentée à hauteur de 6% dans les superalliages monocristallins de 3ème génération tels que le CMX10, le René N6 ... [Erickson, 1996, Walston et al., 1996]. Cependant, l'introduction de cet élément rhénium (Re) dans la microstructure peut aussi

causer la formation de grains parasites, de même que la précipitation de phases intermétalliques fragiles topologiquement compactes (phases de type σ , phases de type $\mu \dots$) dans la phase γ .

Pour résoudre ce problème, différentes solutions ont été adoptées. Certains ont choisi d'ajouter un autre élément (le Ruthenium - Ru) pour obtenir une microstructure plus stable caractéristique des superalliages monocristallins de 4ème génération tel que le MX-4 [Walston et al., 2004], tandis que d'autres ont essayé de moins charger la microstructure en élément (Re) (René N515 contient uniquement une concentration massique de rhénium d'environ 1.5% au lieu de 6% [Fink et al., 2010]).

L'incorporation en grande quantité d'éléments lourds comme le Re, le Ru et le Ta a entraîné une augmentation de la masse volumique. C'est la raison pour laquelle, même si les superalliages monocristallins de 5ème et de 6ème génération [Sato et al., 2007; 2008, Kawagishi et al., 2012] sont dotés de bonnes propriétés thermomécaniques, ils restent pénalisés par leur masse volumique et surtout par leur coût qui les rend difficilement exploitable à l'échelle industrielle.

Caractérisation de l'interface γ' / γ dans les superalliages base nickel

Les différences de propriétés (paramètre de maille, composition chimique ...) entre les précipités γ' et la matrice γ entraînent la création d'une interface entre ces deux phases. Le paramètre de maille de l'intermétallique Ni_3Al , qui est sensiblement égal à 3.567 Å [Mauer et al., 1985], est supérieur à celui du nickel, qui est environ de l'ordre de 3.52 Å [Kittel et al., 1976]. Le paramètre de maille de la phase γ peut néanmoins augmenter, du fait d'un alliage avec d'autres éléments (Re, Ru ...) ayant des rayons atomiques plus grands que celui du nickel. Si les deux phases ont la même orientation cristallographique, différentes types d'interfaces (Figure 1.24) peuvent être observées selon le désaccord paramétrique (*misfit* en anglais) issu de l'écart entre les valeurs des paramètres de mailles des deux phases.

Si la valeur du paramètre de désaccord est différente de zéro, l'interface qui se forme peut être incohérente ou semi-cohérente (Figure 1.24a). Dans ce cas, des dislocations peuvent se former au niveau de l'interface entre les phases γ' et γ pour accommoder les contraintes dues au désaccord paramétrique. Lorsque la valeur du paramètre de désaccord est proche de zéro, une interface cohérente peut se former (Figure 1.24b). Dans ce cas, il ne se forme pas de dislocations au niveau de l'interface. Néanmoins, on peut observer une distorsion de la matrice causée par les contraintes issues du désaccord paramétrique. Si la valeur du paramètre de désaccord est différente de zéro, des observations expérimentales de même

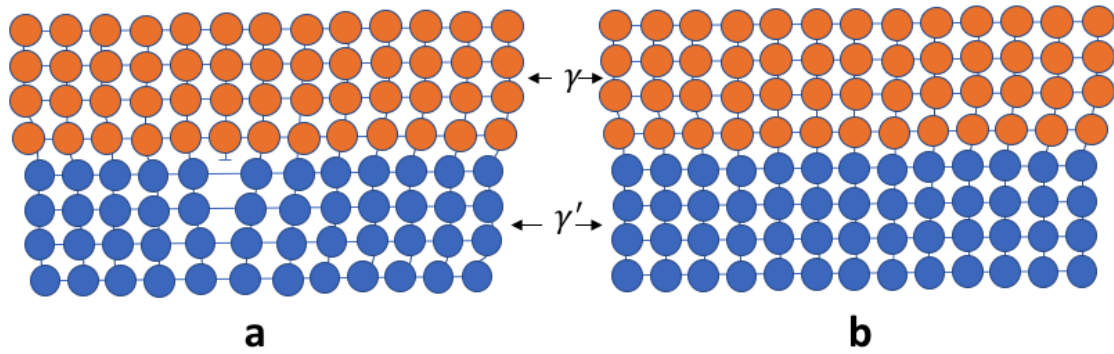


FIGURE 1.24 – Exemple de types d’interfaces pouvant se créer entre les phases γ' (en bleue) et γ (en orange) : (a)-interface semi-cohérente avec la formation d’une dislocation de type coin pour accommoder les contraintes dues au désaccord paramétrique, (b)-interface cohérente avec une distorsion de la matrice due aux contraintes issues du désaccord paramétrique.

que des études numériques ont montré que pour accommoder les contraintes dues au désaccord paramétrique, des dislocations dites de désaccord peuvent se former au niveau de l’interface [Sugui et al., 2000, Wu et al., 2011].

Des observations expérimentales lors des phases de déformation en fluage primaire et secondaire sur le superalliage CMSX-10 ont montré que les dislocations qui se forment majoritairement à l’interface ont souvent des vecteurs de Burgers du type $1/2 \langle 110 \rangle$ (Figure 1.25). Si les précipités constituent des obstacles aux déplacements des dislocations de la matrice, les dislocations de misfit sont des barrières supplémentaires qui contribuent à la protection des précipités [Zhu et al., 2013]. Des simulations numériques en dynamique moléculaire ont aussi montré que sous l’influence de la température, la forme, de même que les types de dislocations de misfit varient [Li et al., 2018] (Figure 1.26). Le degré de cohérence au niveau de l’interface dépend aussi de la taille des précipités. Plus le précipité est gros, plus sa morphologie change et plus il perd sa cohérence [Grosdidier et al., 1998]. Cependant la taille à partir de laquelle il perd sa cohérence avec la matrice dépend du désaccord paramétrique. Ce dernier est défini par un paramètre de désaccord (δ) qui est donné par l’expression suivante :

$$\delta = 2 * \frac{a_{\gamma'} - a_{\gamma}}{a_{\gamma'} + a_{\gamma}}. \quad (1.1)$$

Dans cette expression $a_{\gamma'}$ et a_{γ} représentent respectivement les paramètres de maille des phases γ' et γ .

La distribution des contraintes issues du désaccord paramétrique n’est pas homogène au niveau de l’interface. Pour des précipités cuboïdes par exemple, des études ont montré

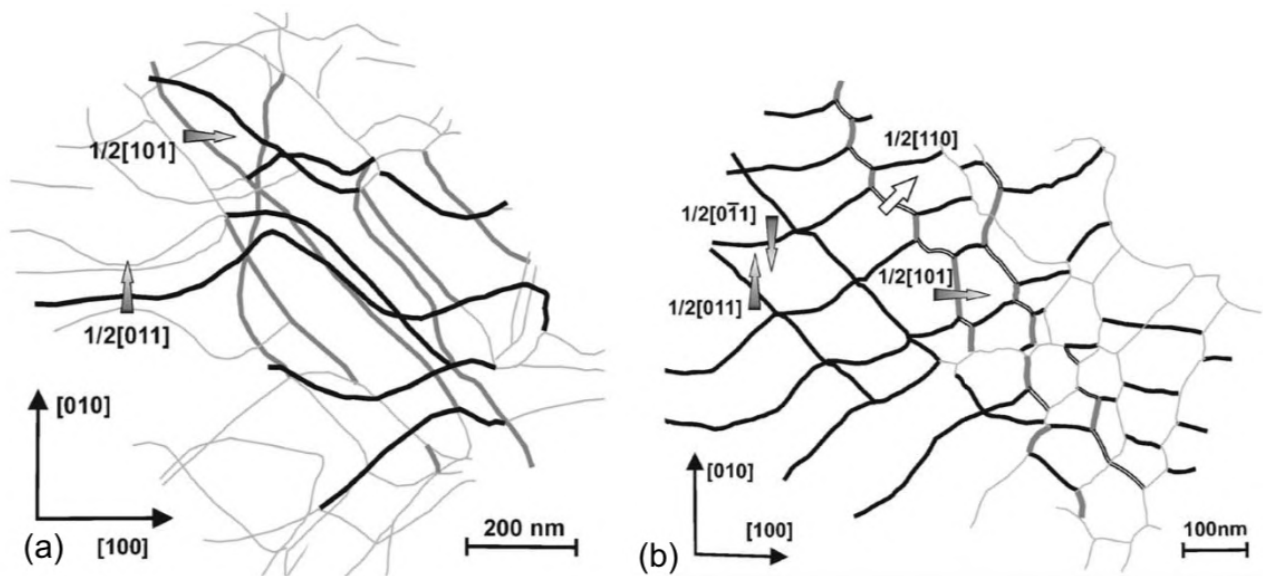


FIGURE 1.25 – Réseau de dislocations interfaciales observées par MET à 1100°C avec une contrainte de 120MPa : (a)-pendant la déformation en fluage primaire dans laquelle on observe un arrangement irrégulier des dislocations qui sont de type $1/2 \langle 110 \rangle$ et (b)-pendant la phase de transition d'une déformation en fluage primaire vers une déformation en fluage secondaire [Link et al., 2005]).

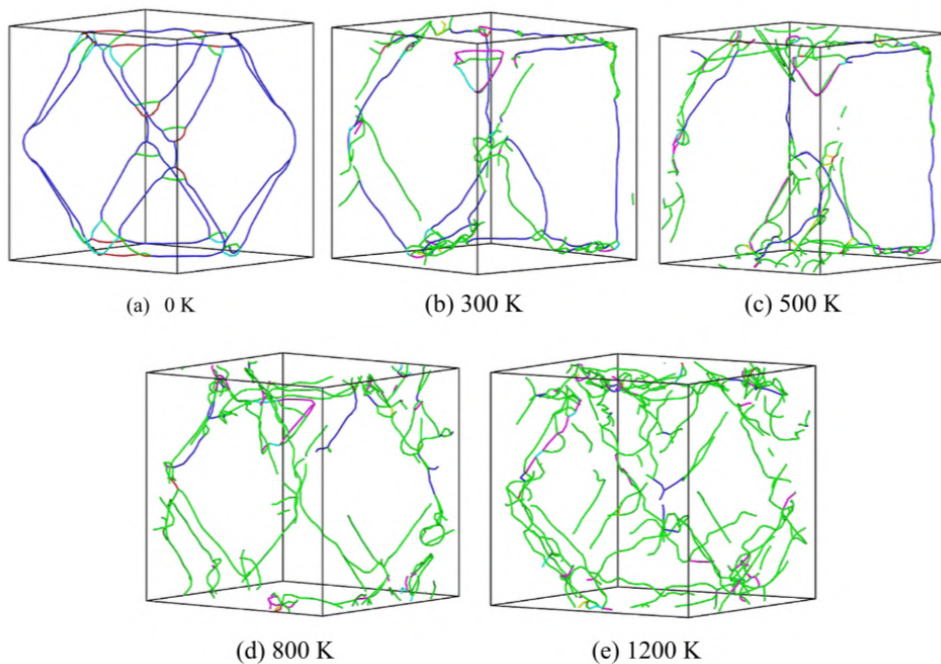


FIGURE 1.26 – Influence de la température sur l'évolution des dislocations interfaciales observée avec des calculs de simulations atomistiques [Li et al., 2018] (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).

que l'amplitude de ces types de contraintes est maximale au niveau des coins [Ganghoffer

et al., 1991, Pollock and Argon, 1994] (Figure 1.27).

Lorsque la température augmente, les deux phases γ' et γ se dilatent naturellement sous

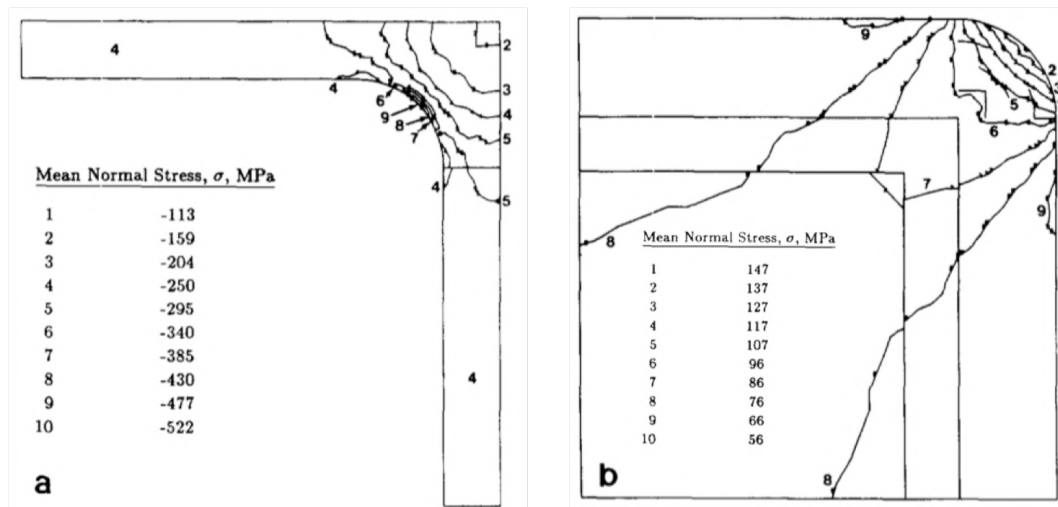


FIGURE 1.27 – Variation de la contrainte de misfit le long de l'interface entre matrice (a) et précipité (b). Les résultats sont obtenus en effectuant des calculs de simulation par éléments finis en 2D [Pollock and Argon, 1994]).

l'effet de la chaleur. Par conséquent, le paramètre de désaccord varie aussi en fonction de la température [Royer et al., 1995, Bruno et al., 2003]. Les paramètres de désaccord dans les alliages base cobalt [Sato et al., 2006, Mughrabi, 2014, Pyczak et al., 2015] sont souvent positifs à cause du paramètre de maille du précipité $Co_3(Al, W)$ qui reste plus important que celui de la phase γ , malgré la dilatation de cette dernière par des éléments plus gros. À l'inverse, dans les superalliages base nickel, la dilatation de cette phase γ engendre souvent un paramètre de désaccord négatif [Nathal et al., 1985]. Sous l'impact de la température, la variation des paramètres de maille des phases γ' et γ entraîne la variation de ce paramètre de misfit. Dans la Figure 1.28, on peut observer la variation des paramètres de maille et du paramètre de désaccord du superalliage base nickel monocristallin NASAIR100 qui est un dérivé du MAR-M247. Avec l'augmentation de la température, il est observé que les paramètres de maille augmentent tandis que le paramètre de désaccord diminue.

L'interface γ'/γ est un site pouvant être la source de plusieurs phénomènes (amorçage et propagation de fissures, nucléation de dislocation ...) potentiellement liés à l'état de contrainte dans laquelle elle se trouve. L'état de contrainte au niveau de l'interface dépend en grande partie du désaccord paramétrique. Ainsi, l'amplitude, de même que le signe du paramètre de désaccord, peuvent avoir des influences non négligeables sur le comportement mécanique du matériau [Mughrabi, 2014, Osawa et al., 2004, Zhang et al., 2010] et doivent dès lors être pris en compte.

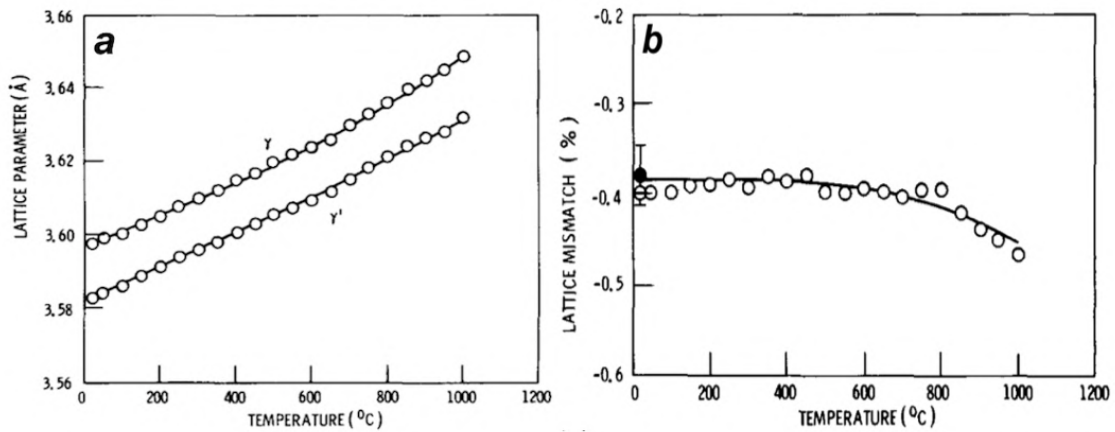


FIGURE 1.28 – Influence de la température sur l'évolution de la microstructure du superalliage monocristallin NASAIR100 : (a)- variation des paramètres de maille des phases γ' et γ en fonction de la température, (b)- variation du paramètre de désaccord au niveau de l'interface γ'/γ [Nathal et al., 1985]).

Propriétés thermiques et mécaniques des superalliages base nickel

Les superalliages base nickel sont souvent soumis à des contraintes thermomécaniques lors de leur élaboration et/ou lors de leur utilisation dans les turboréacteurs. Les contraintes thermiques peuvent entraîner la dilatation du matériau, laquelle peut être caractérisée par un coefficient de dilatation thermique (α). L'évolution du paramètre de désaccord en fonction de la température découle de la différence entre les coefficients de dilatation des précipités et de la matrice. Des études ont montré que le coefficient de dilatation d'un superalliage base nickel, mesuré pour une différence de température donnée, est sensible à la composition chimique des phases γ et γ' [Hwang et al., 1984, Kim et al., 2012]. Pour évaluer la valeur du coefficient de dilatation, différentes méthodes peuvent être utilisées. [Hwang et al., 1984] ont utilisé un modèle de régression pour évaluer la valeur du coefficient de dilatation qui dépend des éléments de l'alliage. Le modèle de regression est donné par l'expression :

$$\alpha = \beta_0 + \beta_1 A + \beta_2 A^2 + \beta_3 B + \beta_4 B^2 + \beta_5 AB + \beta_6 C + \dots \quad (1.2)$$

où $\beta_0, \beta_1, \beta_2 \dots$ représentent les coefficients de la régression et $A, B, C \dots$ correspondant aux quantités des éléments (wt%) présentes dans l'alliage. [Kim et al., 2012], pour évaluer les valeurs des coefficients de dilatation des phases γ et γ' à pression constante, ont plutôt utilisé le modèle donné par l'expression :

$$\alpha = \frac{1}{3V_{0T}} \left(\frac{\partial V_{0T}}{\partial T} \right)_{P=cte} \quad (1.3)$$

Alliages	Composition chimique en wt%												α en ($10^{-6}/^{\circ}\text{C}$)
	Ni	Cr	Ti	Al	Mo	W	Mn	Co	Fe	Nb	Si	C	
J1 (800°C)	67.77	12.07	1.08	0.79	17.85	13.60
JW9 (800°C)	55.60	14.33	1.09	0.72	10.30	16.91	0.51	12.50
A1 (538°C)	80.20	12.0	0.5	...	7.0	...	0.25	0.03	15.41
A6 (538°C)	69.20	12.0	5.0	...	0.5	...	13.0	...	0.25	0.03	14.62

TABLE 1.1 – Valeurs de coefficients de dilatation de certains alliages selon leur composition chimique : les coefficients de dilatation de J1 et JW9 sont mesurés de la température ambiante à une température de 800°C [Alman and Jablonski, 2004], ceux de A1 et A6 sont mesurés de la température ambiante à une température de 538°C [Hwang et al., 1984].

Dans cette expression, V_{0T} représente le volume d'équilibre à la température T . Le tableau 4.8 montre des valeurs de coefficients de dilatation pour certains alliages selon leur composition chimique.

De la même manière que les autres métaux (Al, Ni, Cu ...), les propriétés mécaniques des superalliages base nickel dépendent à la fois de l'organisation de leur microstructure et des conditions de sollicitation. La présence de précipités durcissants (γ') ont des influences non négligeables sur les propriétés mécaniques des superalliages base nickel. Des limites d'élasticité plus importantes ont été trouvées sur des superalliages contenant des précipités durcissants comparés à ceux qui en sont dépourvus [Harte et al., 2020]. Cependant, ces derniers ne contenant pas de précipité, ont une elongation plus importante (Figure 1.29). La taille des précipités a aussi une influence sur le comportement mécanique. À température ambiante, [Harte et al., 2020] ont montré que les superalliages contenant des précipités de plus petites tailles ont des limites d'élasticité plus importantes que ceux contenant des précipités de plus grosses tailles (Figure 1.29). Des résultats similaires ont été trouvés par [Grant et al., 2012] à température ambiante aussi bien qu'à une température de 500°C (Figure 1.30). Les études ont été effectuées sur trois populations de précipités de tailles 90nm (précipités de taille fine), 130nm (précipités de taille moyenne) et 230nm (précipités de grande taille). L'augmentation de la fraction volumique de ces précipités contribue souvent de manière significative à une augmentation de la résistance mécanique des superalliages [Murakumo et al., 2004, Lapin et al., 2009]. Cependant, il existe un seuil de fraction volumique à partir duquel on note une diminution de cette résistance (Figure 1.31). Sous l'effet de la température, certaines propriétés mécaniques comme le module de Young et la limite d'élasticité aussi peuvent varier [Miodownik et al., 2004]. La Figure

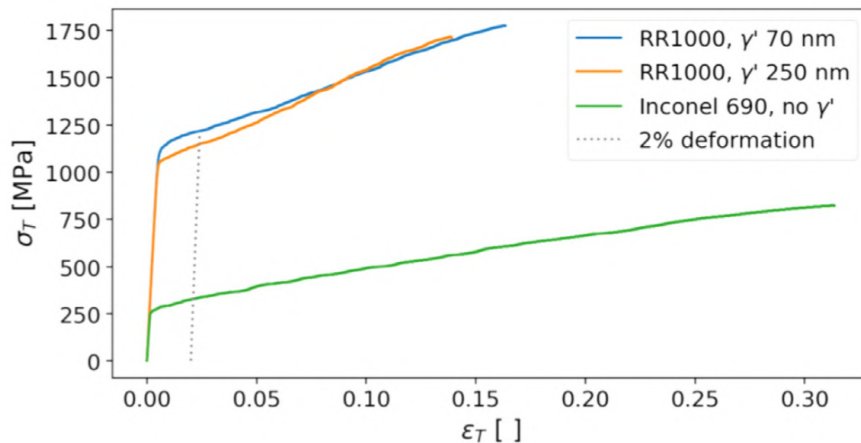


FIGURE 1.29 – Influence de la microstructure sur le comportement mécanique : variation de la limite d'élasticité et de l'allongement à la rupture respectivement en fonction de la taille des précipités et de la composition de la microstructure à température ambiante [Harte et al., 2020]).

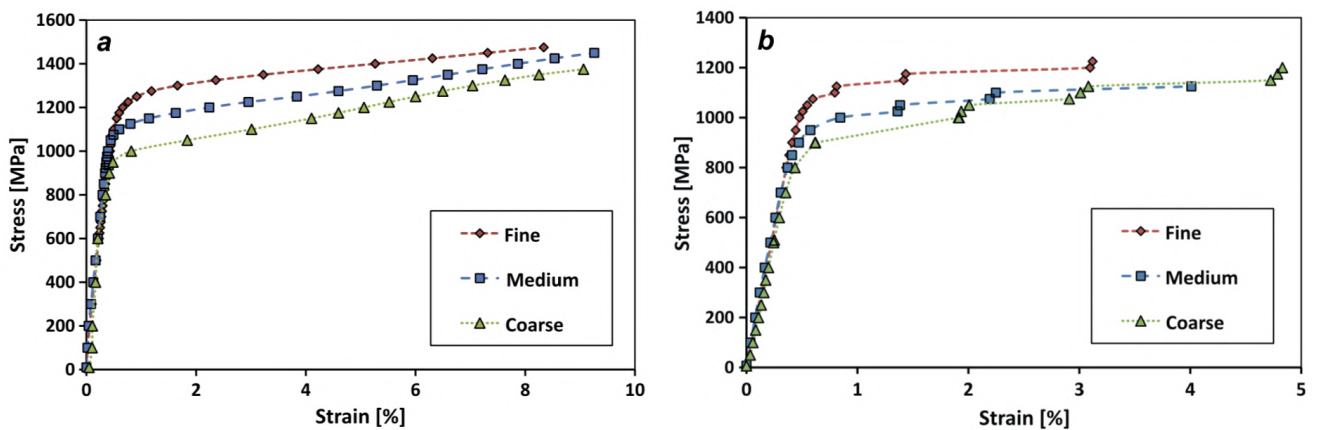


FIGURE 1.30 – Influence de la taille des précipités sur la limite d'élasticité : à température ambiante (a) et à une température de 500°C (b) [Grant et al., 2012].

1.32a présente une évolution du module de Young de différents types de superalliages en fonction de la température. Avec l'augmentation de la température, il est à noter une diminution de la rigidité qui se caractérise par une baisse du module de Young. La variation de la limite d'élasticité de certains superalliages en fonction de la température a été également observée (Figure 1.32b). Contrairement au module de Young, il est souvent constaté une augmentation de la limite d'élasticité avec l'accroissement de la température jusqu'à une certaine température seuil, à partir de laquelle elle commencera à diminuer [Reed, 2006]. Ce phénomène, connu sur le nom d'anomalie de contrainte ou "yield stress anomalie" (YSA) en anglais, est une des caractéristiques qui fait que les superalliages sont très convoités pour la fabrication de pièces, souvent soumis à des sollicitations à hautes températures. Du fait de la richesse du système γ/γ' , les superalliages base nickel présentent des comportements mécaniques très riches, mais très complexes, qui dépendent

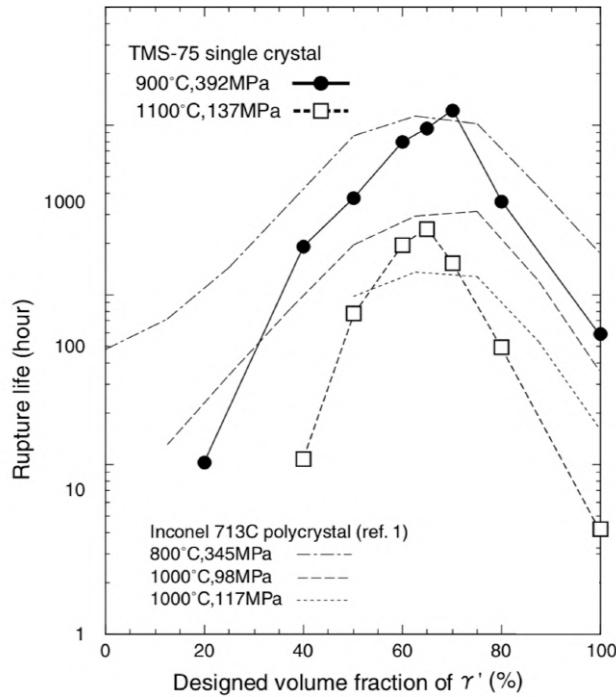


FIGURE 1.31 – Influence de la fraction volumique sur le comportement mécanique : variation de la durée de vie en fonction de la fraction volumique des précipités γ' [Murakumo et al., 2004]).

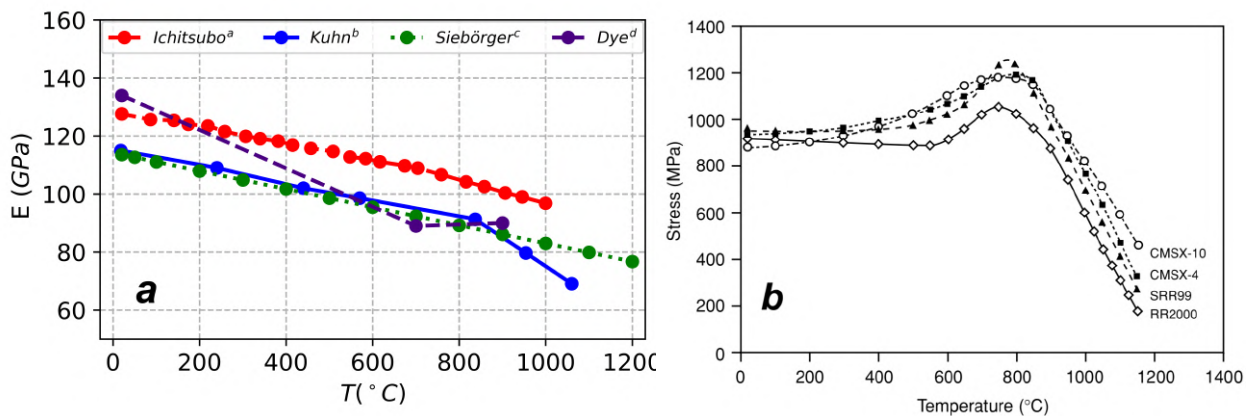


FIGURE 1.32 – Comportement mécanique des superalliages base nickel : variation du module de Young (a) [Ichitsubo et al., 2003]^a, [Kuhn and Sockel, 1988]^b, [Siebörger et al., 2001]^c, [Dye et al., 2009]^d et de la limite d'élasticité (b) [Reed, 2006] en fonction de la température.

de plusieurs paramètres. Des études ont montré qu'une augmentation de la vitesse de sollicitation peut entraîner une augmentation de limite d'élasticité et de l'allongement à la rupture [Hrutkay and Kaoumi, 2014]. Tous ces facteurs qui ont des influences non négligeables sur les propriétés mécaniques, peuvent aussi avoir des effets sur le comportement mécanique (mécanisme de plasticité) des superalliages.

Comportement mécanique des superalliages base nickel : mécanismes dislocationnels

La plasticité dans les superalliages est en grande partie pilotée par le mouvement des dislocations. Ces dislocations peuvent se créer dans la matrice lors du traitement thermomécanique ou au niveau de l'interface par les contraintes de désaccord paramétrique. La matrice et les précipités ont les même 12 systèmes de glissement ($\{111\} \langle 110 \rangle$). Lorsqu'une contrainte est appliquée, les dislocations vont se mettre en mouvement dans la matrice. Pour des questions de stabilité énergétique, la dislocation de vecteur Burgers $a/2 \langle 110 \rangle$ peut se dissocier en dislocations partielles de Shockley de vecteur Burgers $a/6 \langle 211 \rangle$ [Kelly and Knowles, 2020]. Ces mouvements de dislocations peuvent créer des défauts planaires tels que les défauts d'empilement. En effet, sans défaut, la structure du nickel, de type CFC, peut être représentée périodiquement par trois plans compacts ... ABCABCABCABCABC ... Lorsqu'un plan est supprimé dans la séquence, on aura la création d'un défaut d'empilement intrinsèque qui correspondra à la séquence d'empilement ... ABCA|CABCABCABC ... (la ligne droite montre l'endroit où le défaut est créé). La création d'un défaut d'empilement extrinsèque correspondra à l'ajout d'un plan dans la séquence, ce qui donnera un empilement de type ... ABCACBCABCABCABC ... (le défaut est indiqué en gras). Les précipités ayant des propriétés différentes de celles de la matrice, constituent des obstacles pour les dislocations. Lorsqu'une dislocation rencontre un précipité, elle est bloquée par ce dernier. Au fur et à mesure que la contrainte appliquée augmente, deux moyens de franchissement sont possibles : le contournement ou le cisaillement.

Le franchissement par contournement d'Orowan

La dislocation qui entre en interaction avec le précipité peut en effet le franchir par contournement sans changer de plan de glissement : c'est ce qu'on appelle le contournement d'Orowan. La Figure 1.33 illustre ce mécanisme [Dubost and Sainfort, 1991]. Au fur et à mesure que la contrainte appliquée augmente, les deux extrémités de la dislocations vont

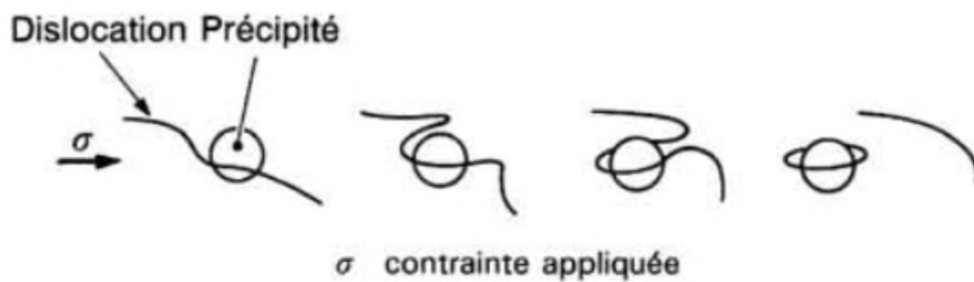


FIGURE 1.33 – Franchissement d'un précipité par le contournement d'Orowan [Dubost and Sainfort, 1991].

envelopper le précipité jusqu'à se rejoindre à l'arrière du précipité. Lorsque la dislocation finit par dépasser le précipité, elle laisse derrière elle une boucle entourant le précipité. Ce mécanisme de contournement peut être causé par une interface incohérente entre la matrice et le précipité, ce qui peut être dû par exemple à une forte différence d'orientation cristallographique entre le précipité et la matrice. En effet, puisque la dislocation reste dans son plan de glissement au niveau de la matrice, le précipité d'orientation cristallographique différente de celle de la matrice devient non cisillable. Dans le cas où l'interface est cohérente (ou semi cohérente), ce type de contournement est simplement dû au fait que le bilan énergétique est favorable à ce mécanisme (cas général). La contrainte dite d'Orowan requise pour avoir ce type de mécanisme est donnée par les expressions suivantes :

$$\tau_{Orowan} = \frac{\mu b}{2R} \sqrt{f_v} = \frac{2T}{bL} \quad (1.4)$$

Dans ces expressions :

μ représente le module de cisaillement ;

b la norme du vecteur de Burgers ;

R le rayon du précipité ;

f_v la fraction volumique de précipité ;

L la distance entre les précipités dans le plan $\{111\}$;

T la tension de la ligne de dislocation.

Les boucles d'Orowan ont été observées expérimentalement dans plusieurs superalliages base nickel. La Figure 1.34 montre des exemples de boucles d'Orowan trouvées dans le superalliage GH4037 [Lv et al., 2015].

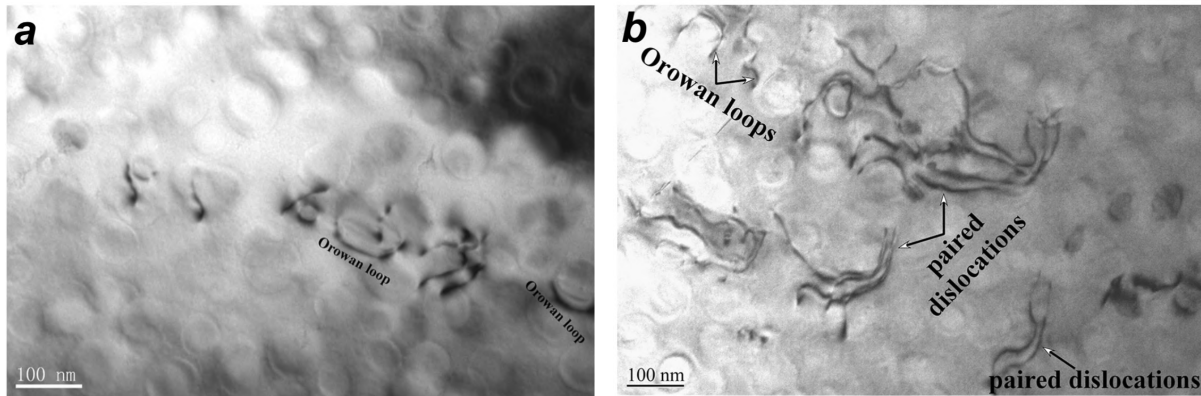


FIGURE 1.34 – Comportement mécanique dans les superalliages base nickel : (a)-boucle d'Orowan encerclant les précipités γ' , (b)-presence de dislocation fortement couplées [Lv et al., 2015].

Le franchissement par cisaillement

Le bilan peut ne pas être favorable au mécanisme de contournement dans le cas où le précipité est cohérent avec la matrice. Dans ce cas le précipité peut être cisailé par les dislocations de différentes manières qui dépendent souvent du diamètre du précipité (cf. Figure 1.35). Lorsqu'un précipité sain (dépourvu de défauts) est cisailé par une dislocation, il se crée un désordre dans les liaisons interatomiques de type $Al - Ni$. Lors du passage de la dislocation, ils se forment des liaisons de type $Al - Al$ et/ou $Ni - Ni$, correspondant à des parois d'antiphases. Pour que l'ordre chimique soit rétabli, une deuxième dislocation de même vecteur Burgers que la première doit cisailier une deuxième fois le précipité. Ainsi, les deux dislocations vont former une paire de dislocations (cf. Figure 1.34). Ces dernières peuvent être fortement ou faiblement couplées. Lorsque la taille du précipité est petite (taille $< D_{ws}$), les dislocations qui le traversent sont faiblement couplées (cf. Figure 1.36). Dans ce cas, l'ordre chimique perturbé n'est pas immédiatement rétabli et on note par conséquent une paroi d'antiphase qui peut se créer dans toute la longueur du précipité. La contrainte de cisaillement des dislocations faiblement couplées (τ_{faible}) est donnée par l'équation 1.5 ([Durand, 2021]) :

$$\tau_{faible} = \frac{\gamma_{APB}}{2b} \left(\left(\frac{2\gamma_{APB} r f_v}{2\pi T_{dis}} \right)^{1/2} - f_v \right) \quad (1.5)$$

dans laquelle :

γ_{APB} est l'énergie de la paroi d'antiphase dans les plans $\{111\}$;

b correspond à la norme du vecteur de Burgers;

r représente le rayon du précipité;

f_v la fraction volumique de précipité;

T_{dis} la tension de la ligne de dislocation.

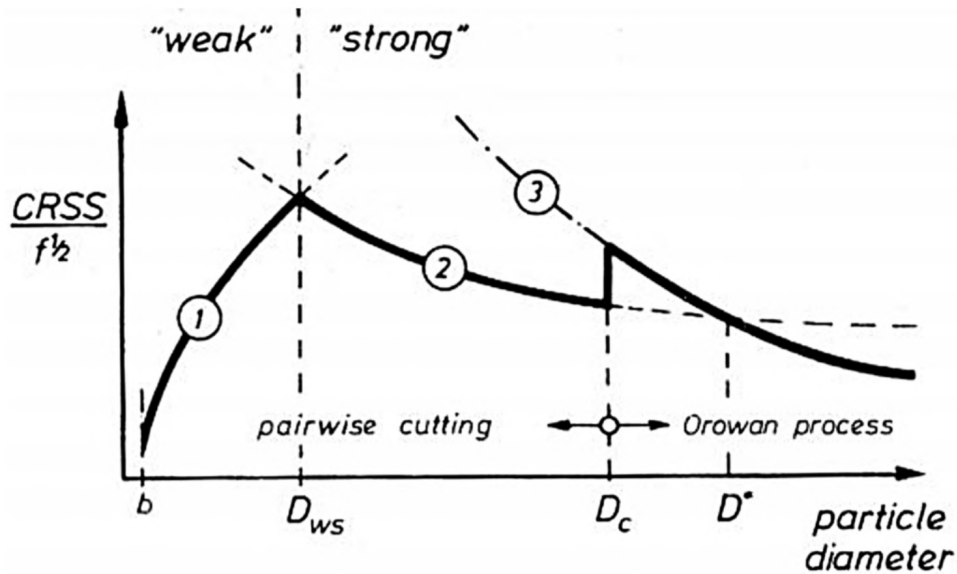


FIGURE 1.35 – Variation de la contrainte de cisaillement résolue (CRSS, Critical Resolved Shear Stress en anglais) en fonction du diamètre des précipités à fraction volumique constante : (1) et (2)-franchissement par cisaillement de précipités avec des dislocations faiblement et fortement couplées respectivement, (3)- franchissement par le mécanisme de contournement d’Orowan lorsque la taille devient supérieur ou égale à D_c d’après le modèle de [Hüther and Reppich, 1978].

Dans le cas où la taille du précipité est assez grande pour atteindre un certain seuil (taille $> D_{ws}$), la première dislocation qui rencontre le précipité nécessite l’aide d’une deuxième dislocation avec laquelle elle va être couplée pour pouvoir cisailer le précipité. On parlera alors de couplage fort [Hüther and Reppich, 1978]. Dans ce cas, l’ordre chimique qui est perturbé par la première dislocation est rapidement rétabli par la passage de la deuxième. La contrainte de cisaillement sera alors donnée par l’expression 1.6 ([Durand, 2021]) :

$$\tau_{forte} = \frac{\gamma_{APB} l_1}{2bL} = \sqrt{\frac{3}{2}} \left(\frac{\mu b}{\pi^{3/2}} \right) \frac{f_v^{1/2}}{r} \sqrt{\frac{2\pi\gamma_{APB}}{\mu b^2} - 1} \quad (1.6)$$

Dans laquelle :

γ_{APB} est l’énergie de la paroi d’antiphase au niveau des plans $\{111\}$;

b correspond à la norme du vecteur de Burgers;

r représente le rayon du précipité;

f_v la fraction volumique de précipité;

l_1 correspond à longueur de la dislocation de tête active dans le cisaillement μ représente le module de cisaillement;

L la distance moyenne entre les précipités.

Plus la taille du précipité augmente, plus le mécanisme de franchissement par cisaillement

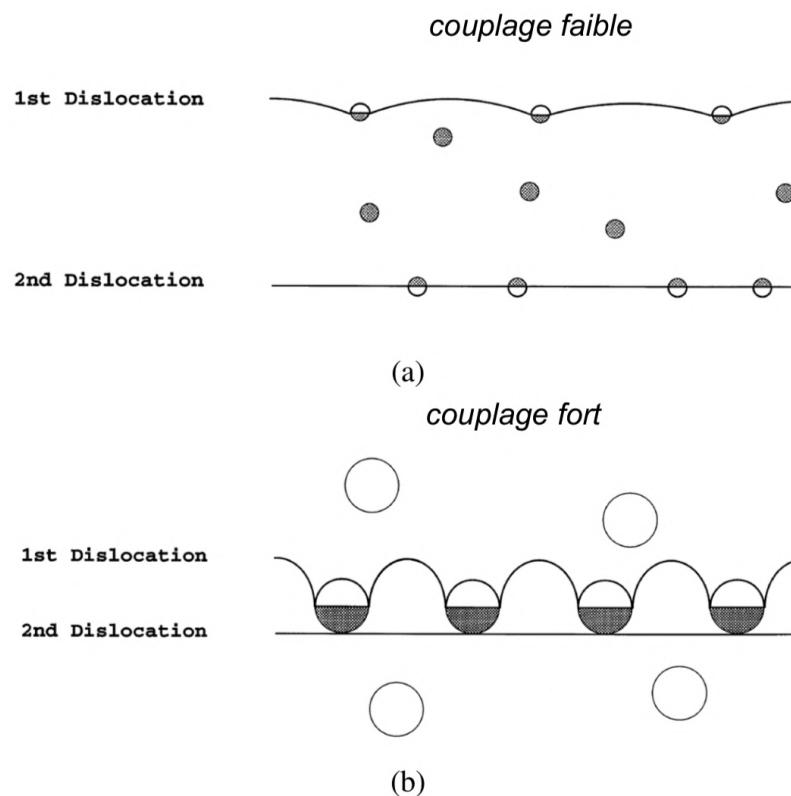


FIGURE 1.36 – Franchissement par cisaillement : (a)-dislocations faiblement couplées (Weak), (b)-dislocations fortement couplées [Jackson and Reed, 1997].

devient moins favorable et plus le mécanisme de franchissement par contournement devient plus favorable.

La forme des précipités a aussi un impact non négligeable sur la plasticité des superalliages. [Prakash et al., 2015] ont montré que la forme du précipité peut avoir un impact sur la nature des dislocations qui se forment au niveau de l'interface et influencer par conséquent de manière significative sur les mécanismes d'interaction entre les dislocations de la matrice et celles de misfit. En effet, si avec une interface courbée, les dislocations de misfit ont la possibilité de se former dans plusieurs plans du fait de la courbure de l'interface, en revanche, avec une interface plane, un seul plan de formation est disponible pour elles. Les dislocations de misfit de vecteurs de Burgers $a/2 < 110 >$ peuvent se dissocier en dislocations partielles de Shockley de type $a/6 < 112 >$ dans les interfaces courbées pour abaisser leur énergie de déformation selon le mécanisme de Frank [Anderson et al., 2017] tandis que les dislocations de misfit qui se forment dans les interfaces planes ne peuvent pas se dissocier.

Lorsque les précipités de petites tailles sont cisailés, différents types de défauts peuvent se créer par dissociation de superdislocation de vecteur Burgers $< 110 >$, pour former d'autres types de défauts tels que : les défauts d'empilement complexes (complex sta-

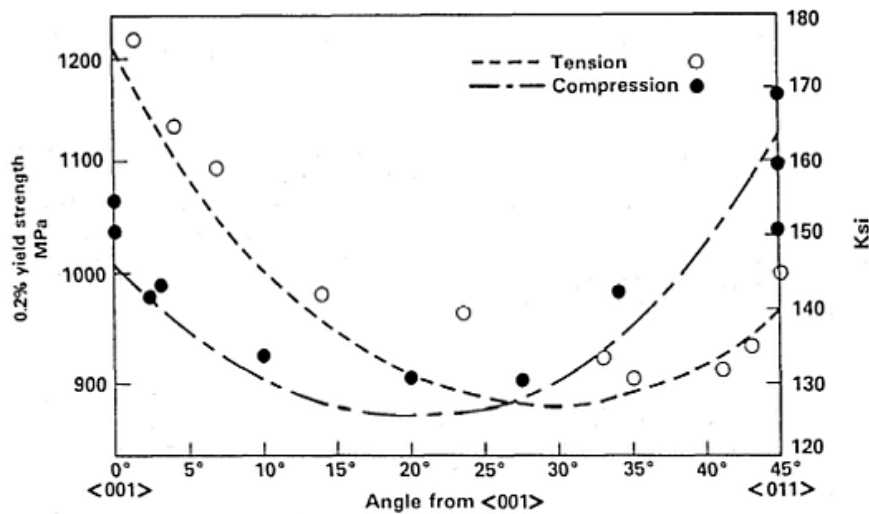


FIGURE 1.37 – Asymétrie en traction/compression : variation de la résistance mécanique en traction et en compression selon l'orientation cristallographique [Shah and Duhl, 1984].

cking fault (CSF) en anglais), des défauts d'empilement intrinsèques et/ou extrinsèques du super réseau (superlattice intrinsic and/or extrinsic stacking fault (SISF) en anglais) ... (pour plus de détails sur les mécanismes de plasticité et de formation de défauts dans les précipités, le lecteur est renvoyé au chapitre 3).

Comportement mécanique des superalliages base nickel : asymétrie en traction/compression

Certains comportements qui ne sont pas habituellement observés dans les matériaux de structure CFC classique (*Al, Ni, Cu ...*), tels que l'anomalie en contrainte, peuvent apparaître sous certaines conditions et sollicitations dans les superalliages base nickel, du fait de l'organisation spécifique de leurs différentes phases (matrice, interface et précipité). Cette anomalie en contrainte est caractérisée par une augmentation de la limite d'élasticité en fonction de la température [Reed, 2006] (cf. Figure 1.32b). De plus, il a été montré que les propriétés mécaniques du matériau peuvent être différentes selon le sens de sollicitation : traction ou compression ([Miner et al., 1986, Décamps et al., 1991]). Ce phénomène, connu sous le nom d'asymétrie en traction/compression dépend de certaines propriétés du matériau telles que l'orientation cristallographique, la température, etc. ([Shah and Duhl, 1984, Heredia and Pope, 1986, Wen et al., 2016]).

Pour autant, l'origine de cette asymétrie n'est pas clairement identifiée à ce jour, les explications disponibles dans la littérature étant variables, et parfois discutables. Ainsi, [Shah and Duhl, 1984] montre une asymétrie en traction/compression fonction de l'orientation

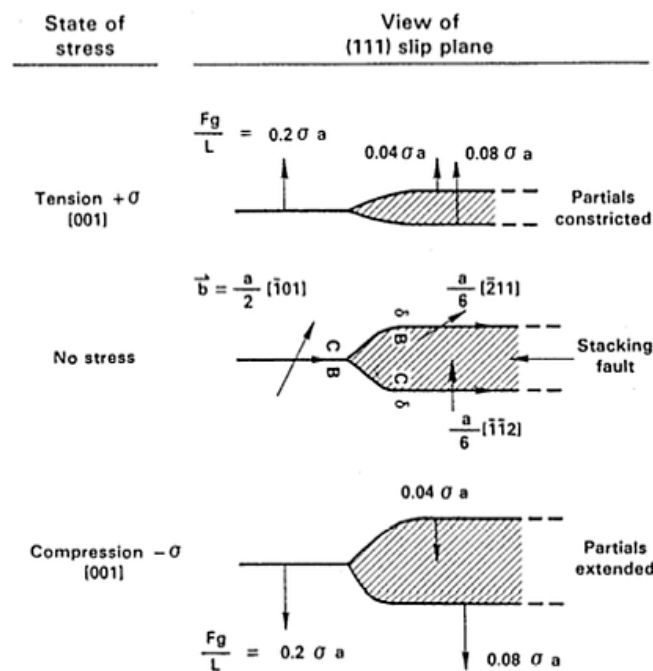


FIGURE 1.38 – Asymétrie en traction/compression dans la direction $[001]$: représentation des modes de glissement favorisant le rapprochement ou l'éloignement des dislocations respectivement en traction et en compression [Shah and Duhl, 1984].

cristallographique (Figure 1.37) sur le superalliage PWA1480 à 593°C . Ainsi, cette asymétrie a été expliquée, dans le cas de l'orientation $\langle 001 \rangle$, par le fait qu'en compression, la force appliquée tendra à accroître les distances entre les dislocations partielles, tandis qu'elle les diminuera en traction (Figure 1.38). Or, le rapprochement des dislocations partielles favorise le glissement dévié, lequel s'accompagne d'un durcissement. Le matériau apparaît ainsi plus résistant en traction qu'en compression. D'autres études, soutenant le même raisonnement, ont montré, en effectuant des chargements cycliques sur le superalliage SC16, que cette asymétrie, caractérisée cette fois en termes de résistance à la rupture, varie à la fois en fonction de la température et de la vitesse de chargement [Jiao et al., 1996, Wang et al., 2014a]. La complexité de la microstructure des superallages influe beaucoup sur la transmissibilité de charge. D'après [Choi et al., 2006], la position des canaux de la phase gamma par rapport à l'axe de sollicitation peut être la source de cette asymétrie car il est plus difficile de déformer horizontalement les canaux parallèles à l'axe de sollicitation lorsque l'on applique une sollicitation en traction que de déformer verticalement les canaux horizontaux perpendiculaires à l'axe de sollicitation dans le cas d'une sollicitation en compression. Les propriétés mécaniques observées à l'échelle macroscopique dépendent de la microstructure. Une modification de cette dernière sous l'influence d'un phénomène tel que la température peut par conséquent affecter l'asymétrie en traction/compression.

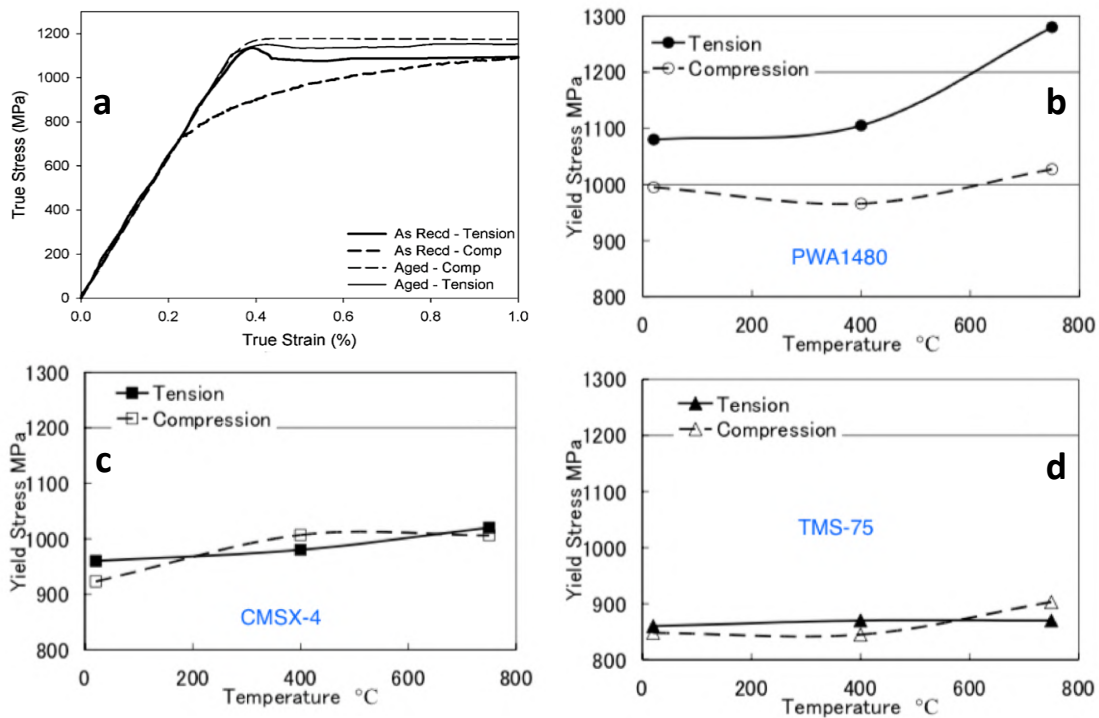


FIGURE 1.39 – Asymétrie en traction/compression : (a)-variation du comportement mécanique selon le sens de sollicitation entre les états vieilli et non vieilli [Sondhi et al., 2004]; (b, c et d)-impact de la microstructure du matériau sur l'asymétrie en traction/compression ([Tsuno et al., 2008]).

Une inversion de l'asymétrie en traction/compression a été observée dans le superalliage IN100 entre ses états avant et après traitement thermique [Sondhi et al., 2004] (Figure 1.39a). En effet, cette asymétrie est aussi sensible à la microstructure du matériau étudié. [Tsuno et al., 2008] rapporte ainsi la présence d'une asymétrie en traction/compression sur la limite d'élasticité dans le superalliage PWA1480 (Figure 1.39b), mais son absence dans les superallages CMSX4 et TMS75 (Figure 1.39c et 1.39d). Cette asymétrie présente dans le PWA1480 a été justifiée par le fait que les précipités ne soient pas cisailés de la même manière en traction qu'en compression. En effet si la quantité de défauts d'empilement intrinsèques (SISF, pour super intrinsic stacking fault en anglais) formée est plus importante en traction qu'en compression, l'inverse a été observé sur la quantité de défauts d'empilement extrinsèques (SESF, pour super extrinsic stacking fault en anglais) formée. Ces résultats montrent combien il est important de mener des investigations supplémentaires pour mieux comprendre ce phénomène d'asymétrie. En effet, on ne dispose pas, à ce jour, d'études expliquant réellement l'origine de cette anomalie.

CONCLUSION DU CHAPITRE

Ce qui est connu

L'étude du comportement mécanique des nano-objets montre que les propriétés mécaniques (module de Young, limite d'élasticité . . .), de même que les mécanismes de déformation, peuvent être différents de ceux habituellement observés dans les matériaux massifs. Une augmentation du module et de la limite d'élasticité est souvent notée lorsque les dimensions du matériau deviennent nanométriques.

Concernant le comportement mécanique des nanoparticules isolées, des questions d'effet de taille, de forme et d'orientation cristallographique ont été discutées en se basant à la fois sur des études numériques et expérimentales. Si certaines études révèlent la présence d'effet de taille dans les nanoparticules isolées, d'autres études privilégient plutôt l'influence de la forme. De plus, les études effectuées sur les nanoparticules isolées ont montré que certains paramètres tels que l'orientation cristallographique ou la présence de certains défauts (interface, macule . . .) ont une influence sur leur comportement mécanique.

Les études présentées dans ce chapitre montrent qu'une bonne utilisation des matériaux nanocomposites métalliques requiert la prise en compte de l'influence des renforts et de l'interface entre matrice et renforts. Si les superalliages base nickel présentent de bonnes propriétés mécaniques, c'est en grande partie grâce à l'organisation de leur microstructure. La présence des précipités dans la matrice de même que les caractéristiques associées aux précipités (taille, forme, degré de cohérence par rapport à la matrice) influent de manière considérable sur les propriétés mécaniques et les mécanismes de déformation des superalliages base nickel.

Les lacunes et les questions de fond

La première interrogation porte sur la méthodologie employée dans le cadre des approches en simulation numérique, et plus particulièrement en dynamique moléculaire. La modélisation des essais de compression est réalisée au moyen d'un champ de force, lequel entre en contact avec la nanoparticule au niveau de sa surface. Or l'initiation des mécanismes de plasticité dans les nanoparticules isolées est souvent pilotée par les propriétés de surface. Se pose alors, à l'issue de cette analyse bibliographique, la question de la pertinence des modèles mis-en-œuvre. Dans quelle mesure les réponses du matériau ne sont-elles pas biaisées par la modélisation des conditions de chargement ?

Les nanoparticules isolées de Ni_3Al ont fait l'objet de plusieurs études compte-tenu de leur rôle dans le cadre plus large des superalliages base nickel. Pour autant, deux aspects importants restent insuffisamment investigués à ce jour : la dépendance de leur comportement mécanique à la température, et la sensibilité à l'orientation de l'axe de sollicitation.

Il a été aussi remarqué à l'issue de l'analyse bibliographique de la partie dédiée à l'étude du comportement mécanique des superalliages base nickel que l'origine de certaines anomalies telles que l'asymétrie en traction/compression observée sur la limite d'élasticité reste floue. En effet, pour expliquer l'origine de cette asymétrie, les études se basent souvent sur la quantification des types de défaut formés à l'intérieur du précipité. Alors que, si la limite d'élasticité est associée aux premiers mouvements des dislocations, elle peut être atteinte avant même le cisaillement du précipité. Donc, en parallèle des questions posées sur le comportement mécanique d'une nanoparticule intégrée dans une matrice par rapport à son comportement lorsque qu'elle est isolée, la question de savoir quelle est la vraie origine de cette asymétrie en traction/compression, observée sur la limite d'élasticité, se pose également.

Programme de travail

Pour répondre à nos interrogations, il a été choisi de se consacrer dans un premier temps à l'étude du comportement mécanique d'une nanoparticule isolée, avant de s'intéresser à celle d'un système composite où la nanoparticule est intégrée dans une matrice. À l'échelle nanométrique, un des outils numériques capable de représenter la microstructure du matériau est la technique de la dynamique moléculaire. En effet cette dernière s'appuie sur des potentiels semi-empiriques calculés en se basant sur des données expérimentales, et permet de bien prendre en compte l'impact des différentes parties de la microstructure (renfort, matrice, interface . . .) du matériau sur le comportement mécanique.

L'objectif du deuxième chapitre de cette thèse est donc consacré à la présentation de cette technique de la dynamique moléculaire et à l'étude de l'impact du modèle de champ de force qui est utilisé pour étudier le comportement mécanique des nanoparticules isolées. Ceci doit permettre de mieux comprendre les mécanismes de base qui régissent le comportement mécanique de ces nanomatériaux, avec la prise en compte à la fois de l'influence des propriétés de surface et du modèle de champ de force. Le lien entre conditions aux limites et mécanismes est au cœur des réflexions de cette partie. Cette étude permet

d'analyser les simulations sur les nanoparticules avec plus de discernement.

Puis, le troisième chapitre est dédié à l'étude du comportement mécanique des nanoparticules isolées de Ni_3Al , en tenant compte de l'impact de la direction de chargement et de la température. Afin d'identifier les paramètres importants (effet de bord, de forme, de la température, ...) qui influent sur le comportement mécanique. Les mécanismes intrinsèques activés dans ces nanoparticules sont recherchés et les paramètres qui les influencent décrits.

Ensuite, le quatrième chapitre s'intéresse à l'étude de l'interaction entre une nanoparticule de Ni_3Al et sa matrice de Ni , dans laquelle elle est intégrée. Ainsi, il est possible d'évaluer l'influence sur le comportement mécanique de la nanoparticule par rapport à son comportement lorsqu'elle est isolée, et le rôle qu'elle joue dans l'effet composite. Plus particulièrement, l'idée ici est de voir au travers d'un système simple $\gamma/\gamma'-Ni/Ni_3Al$, s'il est possible d'expliquer certains comportements mécaniques observés dans les superalliages base nickel (asymétrie en traction/compression, influence de la fraction volumique, de la température, etc.), en s'appuyant sur la technique de la dynamique moléculaire appliquée à des systèmes représentatifs judicieusement choisis.

Enfin, le cinquième chapitre a pour but d'étudier l'effet de la forme et la fraction volumique du renfort sur le comportement mécanique du système $\gamma/\gamma'-Ni/Ni_3Al$ considéré. L'objectif est d'élargir notre champ de compréhension, avec la prise en compte de l'influence de ces deux caractéristiques, sur l'évolution du comportement mécanique et des mécanismes observés.

MÉTHODOLOGIE

SOMMAIRE

DÉFINITION DU POTENTIEL INTERATOMIQUE	53
Les potentiels de type paire	53
Les potentiels multi-corps	54
CHOIX DU POTENTIEL	55
Potentiel utilisé pour l'aluminium et le nickel	56
Potentiel utilisé pour le Ni_3Al/Ni	57
DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE CLASSIQUE : DÉFINITION ET PRINCIPE	60
Minimisation et calcul des positions initiales	61
Intégration et calcul des positions au cours de la simulation	61
Thermalisation et équilibrage	63
DÉFINITIONS DE LA DÉFORMATION ET DE LA CONTRAINTE AUX ÉCHELLES FINES	64
Déformation d'une nanoparticule	64
Contrainte axiale et contrainte sur un atome	65
Méthodes de sollicitation d'un système isolé : les nanoparticules	67
Méthodes de sollicitation d'un système non isolé	70
Estimation de la surface de contact et calcul de la contrainte appliquée	70
ANALYSE CRITIQUE DE LA REPRÉSENTATIVITÉ PHYSIQUE DE LA MODÉLISATION DE LA SOLLICITATION MÉCANIQUE DES NANOPARTICULES EN DYNAMIQUE MOLÉ- CULAIRE	72
PROPOSITION D'AMÉLIORATION DE LA MÉTHODE DE MODÉLISATION	74
Description de la méthodologie et des champs de force utilisés	74
Présentation des résultats sur l'impact du modèle de champ de force sur le compor- tement mécanique	77

Présentation des résultats sur l'impact du modèle de champ de force sur l'effet de taille et/ou de géométrie de surface	87
Discussion de l'influence du modèle de champ de force selon la direction de chargement	89
Discussion de l'influence du modèle de champ de force sur l'effet de taille et/ou de forme	93
CONCLUSION	99
Par rapport à la littérature	99
Ce qui est nouveau	99
Ce qu'il faut retenir	100

=====

DANS le cadre de cette thèse, nous nous intéressons au comportement mécanique des nanoparticules isolées ou intégrées dans une matrice à l'échelle microscopique. Pour ce domaine d'étude, la technique de la dynamique moléculaire (DM) est une des méthodes les plus appropriées pour une meilleure analyse du comportement mécanique et des mécanismes de plasticité. Cette technique permet d'étudier la réponse du matériau en réalisant des essais virtuels et en analysant l'évolution des interactions inter-atomiques. Si les capacités de la dynamique moléculaire ne sont pas à remettre en cause, la modélisation d'essais virtuels est sujette à discussion. Il n'existe pas une voie unique pour élaborer de tels modèles. Plusieurs solutions se présentent à nous pour appréhender les interactions entre l'objet étudié et le moyen d'appliquer un chargement. Ces techniques méritent d'être discutées, car elles sont susceptibles d'avoir une influence non négligeable sur les résultats obtenus [Durville et al., 2003, Ziegenhain et al., 2009, Shreiber and Mordehai, 2015].

Des questionnements légitimes se posent sur la représentativité de certaines grandeurs utilisées en DM tels que le modèle de champ de force virtuel qui est utilisé lors de la compression des nanoparticules ou encore de certains paramètres microstructuraux telle que la surface de contact qui doit être évaluée afin de pouvoir calculer la contrainte appliquée lors de la compression des nanoparticules isolées.

Ce chapitre a pour objet d'évaluer les hypothèses inhérentes aux tests virtuels conduits avec la technique de dynamique moléculaire (DM) qui seront utilisés comme moyen de calcul pour les études que nous menons sur le comportement mécanique de certains nanomatériaux (nanoparticules isolées d'aluminium et de nickel, nanoparticules isolées de Ni_3Al).

Dans cette partie, la définition et le choix des potentiels interatomiques utilisés dans les

simulations de dynamique moléculaire sont discutés, les différentes étapes de cette technique sont présentées, avant de se questionner sur la manière dont on se sert de cette méthode en tant que mécanicien dans l'étude du comportement mécanique des nanomatériaux.

DÉFINITION DU POTENTIEL INTERATOMIQUE

Un des éléments les plus importants dans l'utilisation de la technique de DM est le potentiel interatomique. Le choix du potentiel interatomique en dynamique moléculaire constitue le socle de la modélisation. Il décrit les interactions entre les particules du système (les atomes qui constituent le matériau à étudier par exemple) au cours du temps et définit la rigidité du matériau. Il permet d'appréhender l'évolution physique du matériau et l'apparition et l'évolution des défauts qui sont susceptibles de se former pendant la déformation du matériau. Ces raisons font que le choix du potentiel est très important, mais la représentativité des résultats obtenus en DM dépend fortement de la représentativité du potentiel.

De manière synthétique, ils existent principalement deux types de potentiels différents selon le nombre de corps pris en compte dans la description des interactions.

Les potentiels de type paire

Les potentiels de type paire décrivent l'interaction entre deux corps. Cette interaction peut être entre le noyau atomique et son nuage électronique, entre deux nuages électroniques de deux atomes, entre deux noyaux atomiques de deux atomes etc.

Dans ces types de potentiel, souvent deux phénomènes sont pris en compte dans la modélisation, à savoir l'attraction à longue distance et la répulsion à courte distance.

Plusieurs potentiels de type paire ont été développés au fil du temps dans plusieurs domaines (potentiel de Coulomb en électrodynamique, la loi de Newton sur la gravitation en mécanique). Mais en mécanique des matériaux, des potentiels spécifiques de type paire tels que le potentiel de Lennard Jones [[Lennard-Jones and Hall, 1924](#)] ou celui de Morse [[Morse, 1929a](#)] sont utilisés. Ces modèles utilisés historiquement dans la description du comportement des matériaux ont pour intérêt de représenter au mieux l'interaction entre deux atomes en fonction de leur distance au cours du temps.

Le potentiel de Lennard Jones est donné par l'expression suivante :

$$E_{ij} = 4\epsilon[(d/r_{ij})^{12} - (d/r_{ij})^6] \quad (2.1)$$

Dans cette expression, E_{ij} représente l'énergie d'interaction entre deux corps en fonction de leur distance d'interaction r_{ij} , ϵ désigne la profondeur du puits de potentiel. Ce potentiel devient nul pour $r_{ij} = d$. Celui de Morse, désignant une autre manière de décrire

l'interaction par pair, est donné par l'expression :

$$E_{ij}^m = D_0[\exp -2\alpha(r_{ij} - r_0) - 2 \exp -\alpha(r_{ij} - r_0)]. \quad (2.2)$$

Ici, E_{ij} est l'énergie d'interaction entre les corps i et j en fonction de leur distance d'interaction r_{ij} . r_0 représente la distance d'équilibre. D_0 correspond à l'énergie de cohésion et α indique le module d'élasticité. Ces deux potentiels sont des modèles empiriques assez simples dont les paramètres sont parfois calés à l'aide d'études expérimentales ou déduits de simulations numériques de la physique des interactions des champs électroniques. Ils permettent de simuler le comportement des matériaux diatomiques avec une assez bonne précision selon le paramètre étudié. Cependant, bien qu'il ait été prouvé que ces potentiels de type paire reproduisent de manière assez fiable certaines propriétés des matériaux (module d'élasticité, résistance critique, niveau de dureté et dépendance par rapport à l'orientation cristallographique), ils présentent des limites par rapport au potentiel dits multi-corps [Ziegenhain et al., 2009]. Ces types de potentiels ne permettent pas par exemple de modéliser l'anisotropie du matériau et sous-estime l'énergie stable de défauts d'empilement. De même, quand le nombre de particules en interaction est supérieur à deux (par exemple pour des systèmes contenant plus de deux types d'atomes en interaction), ces modèles ne peuvent pas être utilisés. C'est pour pallier à ces limitations que l'on utilise principalement de nos jours les potentiels dits multi-corps. Néanmoins, avec certains systèmes complexes composés de sous-systèmes ayant des propriétés différentes, le potentiel multi-corps permettant de décrire l'interaction de tous les éléments inter et intra sous-systèmes n'est pas toujours disponible. Dans ce contexte, il est possible de combiner les approches en faisant appel au potentiel de type paire pour décrire les interactions inter sous-systèmes et utiliser les potentiels multi-corps pour décrire les interactions intra sous systèmes [Imran et al., 2012, Peng et al., 2010].

Les potentiels multi-corps

Les potentiels multi-corps, de la même manière que les potentiels de type paire semi-empiriques, sont des modèles souvent non démontrés théoriquement et qui contiennent des paramètres ajustés à l'aide de données expérimentales ou de simulations de la physique des interactions. Dans les systèmes métalliques où la densité atomique n'est pas uniforme, les modèles dits de l'atome intégré, introduits vers les années 1980 par [Daw and Baskes, 1984] et [Foiles et al., 1986], sont ceux qui sont souvent utilisés en DM classique pour l'étude du comportement mécanique des matériaux CFC. Ces potentiels contraire-

ment aux potentiels de type paire prennent en compte l'interaction entre plusieurs corps tout en tenant compte de l'influence de la densité électronique et sont donc naturellement plus complets. L'expression du potentiel d'interaction $E_i(r_{ij})$ calculé en une position r_i d'un atome i considéré avec ses N_j voisins pour tout $i \neq j$ est donnée par :

$$E_i(r_{ij}) = \sum_{j=1}^{N_j} \rho(r_{ij}) + 1/2 \left(\sum_{j=1}^{N_j} \phi(r_{ij}) \right). \quad (2.3)$$

Comme on peut le voir à travers la formulation, ce modèle est composé de deux parties : le premier terme représente la partie intégrée (*Embedded*) où l'on considère que chaque atome est immergé dans un nuage d'électrons. Ce terme est représenté par une fonction qui dépend de la densité électronique $\rho(r_{ij})$, qui est elle-même fonction de la position r_{ij} ; le deuxième terme $\phi(r_{ij})$ définit un terme d'interaction de type paire entre l'atome considéré i et ses voisins j .

CHOIX DU POTENTIEL

Une autre étape très importante dans la procédure de modélisation et de simulation est le choix du potentiel. En effet la fiabilité des résultats repose en grande partie sur la fiabilité du potentiel (sa capacité à prendre en compte le mécanisme étudié). Pour valider le choix du potentiel en simulation mécanique de DM, on se base souvent sur le calcul numérique des valeurs de certains paramètres tels que les constantes d'élasticité, l'énergie de défauts d'empilement, que l'on compare avec ceux du matériau réel étudié expérimentalement.

Dans le cadre de notre étude, il a été fait le choix d'utiliser les potentiels de type multi-corps semi-empiriques car en plus d'être simples à utiliser, ces derniers ont une bonne capacité à représenter les systèmes complexes (systèmes contenant plusieurs types d'atomes, systèmes avec des densités atomiques différentes avec la prise en compte de l'effet des voisins ...) [Gades and Urbassek, 1992]. De plus ils ont été utilisés avec succès dans la modélisation du comportement mécanique des nanomatériaux [Bian and Wang, 2013, Salah et al., 2017, Amodeo and Lizoul, 2017, Kilymis et al., 2018]. Ils sont notamment connus pour leur fiabilité à représenter certains défauts tels que la nucléation et la propagation des dislocations, la formation de défauts d'empilement, de macles, etc.

Plusieurs potentiels de types semi-empiriques ont été développés dans la littérature et leur choix doit dépendre de leur capacité à représenter les propriétés que l'on souhaite appréhender.

Matériau	Référence	Constantes élastiques					Energies de fautes		
		B (GPa)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)	μ (GPa)	γ_{isf} (mJ.m ⁻²)	γ_{usf} (mJ.m ⁻²)	γ_{utf} (mJ.m ⁻²)
Aluminium	[Liu et al., 2004]	83,72	121,4	64,87	34,13	31,67	168,7	170,52	221,59
	[Mishin et al., 1999]	77,96	112,8	60,53	31,8	28,03	156,6	189	240,1
	Expérimental	79	108,2	61,3	28,5	26,5	166		
Nickel	[Mishin et al., 1999]	186,9	255,72	152,48	131,6	78,28	122,32	382,5	442,9
	[Angelo et al., 1995]	180,8	246,92	147,72	125	79,18	125,07	264,3	316,4
	Expérimental	181	246,5	147,3	124,7	94,7	125		
Cuivre	[Foiles et al., 1986]	138,6	168,73	123,5	76,68	40,63	13,75	159,34	166,2
	[Ackland et al., 1987]	147,47	179,76	131,32	81,27	32,24	52,48	373,48	399,72
	[Mishin et al., 2001]	139,48	171,03	123,7	76,36	41,23	44,7	180,6	203
	Expérimental	138,3	168,4	121,4	75,4	54,6	45		

TABLE 2.1 – Valeurs obtenues avec le potentiel de [Mishin et al., 1999] pour l’Al, le Ni et le Cu [Salah, 2018]. Les valeurs sont comparées avec des données expérimentales issues de la littérature.

De ce fait, avant de faire le choix définitif du potentiel, il est nécessaire de vérifier les étapes de validation basées sur des résultats expérimentaux ou des calculs ab-initio. Dans le cadre de notre étude, quatre types de matériaux sont envisagés :

- des nanoparticules isolées d’aluminium et de nickel,
- des nanoparticules isolées de Ni_3Al ,
- des nanoparticules de Ni_3Al intégrées dans une matrice de Ni .

Potentiel utilisé pour l’aluminium et le nickel

Le potentiel utilisé pour l’étude du comportement mécanique de l’aluminium et du nickel est celui de [Mishin et al., 1999]. Ce dernier a été validé dans les études menées par [Salah, 2018] en considérant d’une part les constantes d’élasticité, calculées à partir du module de cisaillement et du module de compressibilité qui peuvent être exprimés en fonction des constantes d’élasticité et de la variation de l’énergie potentiel élastique, et d’autre part en calculant les énergies défauts d’empilement stable (ou intrinsèques), instable (l’énergie nécessaire pour créer une dislocation) et de macle (l’énergie nécessaire pour créer une macle). Les valeurs obtenues pour trois types de matériaux CFC (Al , Ni et Cu) et qui sont mentionnées dans le tableau 2.1 ont été comparées à des données expérimentales issues de la littérature. Pour élargir la comparaison, les valeurs obtenues avec ce potentiel ont aussi été comparées avec les résultats issus d’autres potentiels. Par rapport aux autres potentiels, les valeurs obtenues avec le potentiel de [Mishin et al., 1999] (constantes d’élasticité et énergies) sont en bon accord avec les valeurs expérimentales de la littérature.

Potentiel utilisé pour le Ni_3Al/Ni

Concernant l'intermétallique Ni_3Al le potentiel utilisé dans le cadre de cette étude est celui de [Du et al., 2012]. Ces derniers ont calculé plusieurs paramètres, puis comparé les résultats des simulations avec des données expérimentales et des données issues des calculs *ab initio*. Trois interactions sont à considérer dans le système que nous étudions : l'interaction $Ni-Ni$, l'interaction $Al-Al$ et l'interaction $Al-Ni$. De ce fait pour les trois systèmes, afin de valider le potentiel, différents paramètres ont été calculés puis comparés avec des résultats expérimentaux et d'*ab initio*. Les valeurs de certains paramètres tels que les constantes d'élasticité ou encore les énergies de certains défauts planaires, calculées avec ce potentiel, sont en bon accord avec les résultats expérimentaux ([Du et al., 2012]). Un autre point très intéressant est que ce potentiel permet la description des interactions de trois éléments (Ni , Al , Re) offrant une possibilité d'élargir le champ d'étude en regardant par exemple l'impact d'un élément tel que le Re sur le comportement mécanique des systèmes $\gamma-\gamma'-Ni_3Al/Ni$. Le paramètre de maille, l'énergie de cohésion et les constantes d'élasticité calculés puis comparés avec des résultats expérimentaux sont donnés dans le tableau 2.2. D'autres valeurs obtenues avec les potentiels de [Voter and Chen, 1986] et de [Mishin, 2004] sont aussi présentées pour comparaison. À partir du tableau 2.2, on peut voir que les résultats obtenus sont en bon accord avec les données expérimentales.

D'autres paramètres très importants liés aux défauts ponctuels tels que l'énergie de formation de cavité et de migration ont été aussi calculés et comparés par rapport aux potentiels de [Voter and Chen, 1986] et de [Mishin, 2004], avec des données expérimentales issues de [Du et al., 2012]. Ces défauts ponctuels, qui peuvent être créés à cause de la vibration thermique lorsque la température du système n'est pas faible, permettent de caractériser certaines propriétés essentielles, telles que la diffusion de certains éléments au niveau de la phase γ dans les superalliages [Reed, 2006]. Ces phénomènes de diffusion pilotent certaines propriétés importantes tels que le fluage et la mise-en-radeau (*rafting*). Les mécanismes d'épinglage (*Pinning*) et de montée (*Climb*) de dislocations sont eux aussi liés à cette diffusion.

Outre ces types de défauts ponctuels, il convient de mesurer la capacité du potentiel à représenter les défauts dits planaires qui sont très importants pour la description du comportement mécanique des matériaux. Ces types de défauts pouvant être créés lors d'un chargement mécanique, sont souvent liés aux mouvements des dislocations (c'est le cas des défauts d'empilement par exemple qui peuvent être créés lors du glissement des dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$ dans une réseau CFC) ou à l'amorçage de l'endommagement (c'est le cas des surfaces telles que les faciès de rupture).

		Elastic constants (Mbar)						
		a_0 (Å)	E_c (eV)	C_{11}	C_{12}	C_{44}	C_{13}	C_{33}
Ni	Experiment	3.52 ^a	4.45 ^b	2.47 ^c	1.47 ^c	1.25 ^c		
	Present EAM	3.52	4.44	2.37	1.50	1.27		
	Voter–Chen ^d	3.52	4.45	2.44	1.49	1.26		
	Mishin ^e	3.52	4.45	2.41	1.51	1.27		
Al	Experiment	4.05 ^a	3.36 ^f	1.14 ^c	0.619 ^c	0.316 ^c		
	Present EAM	4.05	3.36	1.14	0.618	0.315		
	Voter–Chen ^d	4.05	3.36	1.07	0.652	0.322		
	Mishin ^e	4.05	3.36	1.17	0.601	0.317		
Ni ₃ Al	Experiment	3.567 ^g	4.57 ^h	2.30 ^d	1.50 ^d	1.31 ^d		
	Present EAM	3.567	4.65	2.42	1.49	1.30		
	Voter–Chen ^d	3.573	4.59	2.46	1.37	1.23		
	Mishin ^e	3.571	4.63	2.36	1.54	1.27		
Re	Experiment	2.76 ⁱ (1.62 ^k)	8.03 ^a	6.16 ^j	2.73 ^j	1.61 ^j	2.06 ^j	6.83 ^j
	Present EAM	2.76 (1.62 ^k)	8.03	5.75	2.66	1.65	2.10	6.83

TABLE 2.2 – Validation du potentiel de [Du et al., 2012] : valeurs des paramètres de maille, des énergies de cohésion et des constantes d'élasticité calculées à une température proche de 0K, puis comparées avec des données expérimentales par rapport aux valeurs obtenues avec d'autres potentiels [Kittel et al., 1996]^a, [Smithells, 2013]^b, [Simmons et al., 1971]^c, [Voter and Chen, 1986]^d, [Mishin, 2004]^e, [Weast et al., 1984]^f, [Mauer et al., 1985]^g, [Hultgren et al., 1973]^h, [Barrett, 1980]ⁱ, [Brandes and Brook, 2013]^j.

Property	Ni				Al			
	Experiment	Present EAM	Voter–Chen ^a	Mishin ^b	Experiment	Present EAM	Voter–Chen ^a	Mishin ^b
Stacking faults								
γ_{sf}	125 ^c	102 ^d	58	134	166 ^c	82 ^d	76	115
γ_{us}		282	225	298		139	93	151
Surfaces								
(1 0 0)	2280 ^c	1591	1745	1936	980 ^c	694	855	607
(1 1 0)	2280 ^c	1694	1977	2087	980 ^c	751	959	792
(1 1 1)	2280 ^c	1499	1621	1759	980 ^c	658	823	601

TABLE 2.3 – Validation du potentiel de [Du et al., 2012] : valeurs des énergies de défauts d’empilement et de surface des énergies comparées avec des données expérimentales par rapport aux valeurs obtenues avec d’autres potentiels ([Voter and Chen, 1986]^a, [Mishin, 2004]^b, [Murr, 1975]^c, [Du et al., 2012]^d).

Les valeurs des énergies de défauts d’empilement et de surface ont été calculées avec ce potentiel et comparées avec des données expérimentales. Les valeurs obtenues avec les potentiels de [Voter and Chen, 1986] et de [Mishin, 2004] sont aussi représentées pour comparaison.

Comme le montre le tableau 2.3, la valeur obtenue avec le calcul de l’énergie de défaut d’empilement du nickel est raisonnablement en bon accord avec la valeur obtenue expérimentalement. En revanche celle obtenue avec l’aluminium l’est moins. Les valeurs obtenues avec le calcul des surfaces sont sous-estimées pour les trois potentiels.

La capacité du potentiel à représenter d’autres types de défauts planaires tels les *APB* (*antiphase boundary*), les *CSF* (*complex stacking faults*), et les *SISF* (*super intrinsic stacking faults*) a aussi été évaluée pour l’intermétallique Ni_3Al . La traversée des dislocations de même que l’anomalie dite de contrainte dans la phase γ' s’accompagne souvent de la formation d’*APB*. L’énergie de *SISF* dans les plans $\langle 111 \rangle$ de même celle d’*APB* dans les plans $\langle 111 \rangle$ et $\langle 100 \rangle$ ont été calculées puis comparées avec des données expérimentales. Par rapport aux valeurs obtenues avec les potentiels de [Voter and Chen, 1986] et de [Mishin, 2004], les valeurs obtenus avec le potentiel de [Du et al., 2012] sont en bon accord avec les résultats expérimentaux (tableau 2.4). Ces résultats obtenus sont aussi en bon accord avec des résultats issus de calculs *ab initio* [Mryasov et al., 2002, Schoeck et al., 1999].

Planar Fault	(111)CSF			(111)APB			(111)SISF			(100)APB		
	Total	Pair	Embed	Total	Pair	Embed	Total	Pair	Embed	Total	Pair	Embed
Experiment ^a	235			175			6			104		
Present EAM	218 ^b	301	-83	168 ^b	274	-106	14 ^b	-43	57	102 ^b	65	37
Voter-Chen ^c	120	119	1	141	140	1	12	6	6	83	80	3
Mishin ^d	202	217	-15	252	267	-15	51	42	9	80	53	27

TABLE 2.4 – Validation du potentiel de [Du et al., 2012] : valeurs des CSF, des APB et des SISF comparées avec des données expérimentales par rapport aux valeurs obtenues avec d’autres potentiels ([Karnthaler et al., 1996]^a, [Du et al., 2012]^b, [Voter and Chen, 1986]^c, [Mishin, 2004]^d).

DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE CLASSIQUE : DÉFINITION ET PRINCIPE

Cette technique de simulation développée dans les années 1950 est aujourd’hui très utilisée dans plusieurs domaines d’études (biologie, chimie, physique)[Trunfio Sfarghiu, 2006]. En science des matériaux et plus particulièrement en mécanique des matériaux, son utilisation ne cesse de croître grâce à l’augmentation des champs d’études et d’analyse à petite échelle qui ont recours de plus en plus aux techniques numériques pour compléter ou parfois remplacer certaines études expérimentales très coûteuses et/ou difficilement réalisables.

La dynamique moléculaire est une technique de simulation moléculaire permettant de décrire l’interaction entre des particules contenues dans une boîte de simulation au cours du temps. Cette description se fait avec l’utilisation d’un potentiel d’interaction qui peut être déterminé soit à partir des premiers principes de la mécanique quantique avec la résolution de l’équation de Schrödinger (méthode précise mais gourmande en temps de calcul donc limitée à des systèmes de petites tailles), on parlera de simulation *ab initio*, soit en utilisant un modèle fixé empiriquement (modèle permettant d’effectuer des calculs sur des systèmes de tailles plus grandes comparées à la méthode *ab initio*), on parlera dans ce cas de dynamique moléculaire classique. Cette dernière méthode, utilisée dans le cadre de cette thèse, est reconnue pour sa fiabilité à reproduire certains phénomènes physiques, tels que la nucléation et le mouvement des dislocations, qui nous permettent en tant que mécanicien d’avoir des informations pertinentes pour étudier le comportement d’un matériau.

Pour ce qui suit, nous allons présenter les différentes étapes de cette technique qui doivent être considérées pour mener une simulation.

Minimisation et calcul des positions initiales

A partir des positions atomiques initialement fixées par l'utilisateur en se basant sur la structure la plus proche de la structure réelle, l'ensemble du système doit être minimisé en termes de positions (ou d'énergie) pour approcher au mieux la configuration la plus probable que le matériau réel peut adopter.

Cette étape de minimisation, faite avec une méthode numérique adaptée (la méthode du gradient conjugué dans notre cas), conduit à une structure plus stable avec une énergie plus basse par rapport à l'énergie de la configuration initialement fixée.

Après l'étape de minimisation, on utilise la deuxième loi de Newton pour calculer la force correspondant à l'énergie ($\vec{grad}E$) de la configuration calculée après l'étape de la minimisation par la relation suivante :

$$\vec{F} = -\vec{grad}E \quad (2.4)$$

Une fois la force calculée, on en déduit l'accélération avec la relation $\vec{F} = m\vec{a}$, puis les vitesses avec la relation $\vec{a} = \frac{d\vec{v}}{dt}$, et enfin les positions avec la relation $\vec{v} = \frac{d\vec{x}}{dt}$.

La connaissance des positions initiales permet de calculer, à l'aide d'un algorithme d'intégration, les positions au cours du temps.

Intégration et calcul des positions au cours de la simulation

Le calcul des positions au cours de la simulation se fait par intégration de la deuxième loi de Newton à l'aide d'un algorithme d'intégration. Le choix de l'algorithme d'intégration est une étape très importante puisqu'il détermine en grande partie la rapidité des calculs. Plus la méthode d'intégration est rapide, tout en assurant la conservation de l'énergie système, mieux elle est.

Les algorithmes utilisés en dynamique moléculaire sont issus de la méthode du développement limité de Taylor [Taylor, 1715]. Un des plus puissants, utilisé dans le cadre de notre étude, est celui de [Verlet, 1967]. Cet algorithme comparé par exemple à la méthode d'Euler [Euler, 1768], offre une plus grande stabilité dans le temps en plus d'être une méthode réversible. Plus précisément l'algorithme de Verlet permet de prédire en se basant sur le développement limité de Taylor, les positions à l'instant $t + dt$ à partir de la connaissance des positions et accélérations à l'instant t .

D'après Taylor [Taylor, 1715], les positions aux temps $t + dt$ et $t - dt$ pour un corps i à la position x_i peuvent être estimées par :

$$\vec{x}_i(t + \delta(t)) = \vec{x}_i(t) + \vec{v}(t)\delta(t) + \frac{\vec{f}_i(t)}{2m}\delta(t)^2 + O(\delta(t)^3) \quad (2.5)$$

$$\vec{x}_i(t - \delta(t)) = \vec{x}_i(t) - \vec{v}(t)\delta(t) + \frac{\vec{f}_i(t)}{2m}\delta(t)^2 + O(\delta(t)^3) \quad (2.6)$$

En sommant les deux termes, on obtient l'expression des positions prédites par l'algorithme de Verlet sous la forme :

$$\vec{x}_i(t + \delta(t)) = 2\vec{x}_i(t) - \vec{x}_i(t - \delta(t)) + \frac{\vec{f}_i(t)}{m}\delta(t)^2 + O(\delta(t)^3) \quad (2.7)$$

Et en faisant une soustraction l'expression de l'algorithme de Verlet des vitesses est donnée par :

$$\vec{v}_i(t) = \frac{\vec{x}_i(t + \delta(t)) - \vec{x}_i(t - \delta(t))}{2\delta(t)} + O(\delta(t)^2) \quad (2.8)$$

Dans la relation, il est intéressant de souligner que grâce à l'annulation des dérivées d'ordre impaires (vitesse, à coup ...), les positions peuvent être actualisées sans même la connaissance des vitesses. De plus, l'annulation de ces dérivées d'ordre impair rend cet algorithme plus simple et plus efficace. En revanche, l'inconvénient est que, même si les positions au temps $(t + \delta(t))$ sont connues, les vitesses elles sont calculées au temps (t) . Pour corriger ce problème, d'autres algorithmes ont été mis au point. On peut citer celui du "saute – mouton" [Birdsall and Langdon, 2018] dans lequel les positions et les vitesses sont recalculées au milieu du pas d'intégration choisi, ou celui de "Verlet vitesse" [Swope et al., 1982] qui n'est rien d'autre que la version modifiée de l'algorithme de Verlet [Verlet, 1967]. Dans ce nouveau schéma, on calcule les positions au temps $t + \delta(t)$ et on en déduit les forces au temps $t + \delta(t)$, afin de mettre à jour les vitesses au temps $t + \delta(t)$ selon les expressions suivantes :

$$\vec{x}_i(t + \delta(t)) = \vec{x}_i(t) + \vec{v}(t)\delta(t) + \frac{\vec{f}_i(t)}{2m}\delta(t)^2 + O(\delta(t)^3) \quad (2.9)$$

$$\vec{v}_i(t + \delta(t)) = \vec{v}_i(t) + \frac{\vec{f}_i(t + \delta(t)) - \vec{f}_i(t)}{2m}\delta(t) \quad (2.10)$$

Ainsi, pas à pas, il est possible de calculer et de suivre à chaque instant les trajectoires de tous les atomes. Et même si l'idée n'est pas de prédire de manière exact la trajectoire d'un seul atome, on est capable d'estimer avec une bonne précision le mouvement de l'ensemble du système tout en assurant que l'énergie de ce dernier reste constante. De même que les positions, les vitesses peuvent aussi être calculées à tout instant, ce qui permet de pouvoir suivre l'évolution de la variation de l'énergie cinétique du système. Il est donc possible de contrôler l'agitation moyenne du système en modifiant sa vitesse moyenne calculée à partir des vitesses individuelles de chaque atome de manière à amener le système à une température d'étude donnée : c'est ce qu'on appelle la "thermalisation".

Une fois que le système est chauffé ou refroidit, il doit alors être équilibré pour établir sa stabilité.

Thermalisation et équilibrage

Une fois les positions initiales connues, l'étape suivante consiste à amener le système à la température d'étude souhaitée, en attribuant au système une vitesse de vibration moyenne correspondant à la température souhaitée. La température moyenne est calculée en considérant les deux expressions explicitées dans l'équation 2.11. Elles permettent respectivement de calculer l'énergie cinétique moyenne d'un corps à partir de la vitesse et de la température moyenne de ce corps suivant les deux relations :

$$E_c = \frac{1}{2}m \langle v \rangle^2 \text{ et } E_c = \frac{3}{2}K_B \langle T \rangle, \quad (2.11)$$

avec K_B la constante de Boltzmann, $\langle v \rangle$ et $\langle T \rangle$ respectivement la vitesse et la température moyenne du système.

Par analogie avec l'expérimental, si nous souhaitons effectuer des simulations mécaniques à température constante, il faut trouver un moyen extérieur pour fixer cette dernière. Ceci peut se faire en dynamique moléculaire avec l'utilisation d'un thermostat. Dans le cadre de cette étude, le thermostat de "Nose – Hoover" [Hoover, 1985] est utilisé. Ce dernier permet d'équilibrer le système en se basant sur l'écart entre l'énergie cinétique du système et l'énergie cinétique correspondant à la température souhaitée.

L'idée principale est d'appliquer une contrainte supplémentaire au système, proportionnelle à la vitesse des particules, de manière à garder l'énergie cinétique du système constante.

Ce coefficient est donné sous la forme :

$$\epsilon = \Delta E_c / Q \quad (2.12)$$

avec Q un paramètre lié à la rapidité de la réponse du thermostat. La force de frottement f correspondante est donnée par $f = -m_i * \epsilon * v_i$.

La montée et la stabilisation de la température se font donc en fixant un paramètre de relâchement (ou temps de relâchement) $\tau = 1/Q$ qui permet de mettre à jour la température. La vitesse de montée, de même que le temps de stabilisation, dépendent de ce temps de relâchement.

Si le temps de relâchement est trop faible, la température peut varier de manière importante. Si il est trop long, le système peut mettre beaucoup de temps à atteindre la température d'équilibre. Il convient donc de trouver un bon compromis pour obtenir une simulation stable dans des temps raisonnables. Une fois que notre système est stabilisé à la température souhaitée, on peut alors fixer les conditions de sollicitation permettant de déformer le matériau afin de déterminer son comportement.

DÉFINITIONS DE LA DÉFORMATION ET DE LA CONTRAINTE AUX ÉCHELLES FINES

L'approche utilisée pour les calculs de contrainte et de déformation en dynamique moléculaire est différent de celle couramment utilisée en mécanique des milieux continus. En effet, l'aspect discret du milieu fait qu'il est difficile de définir une surface, et donc une contrainte similaire, à la définition classique de la mécanique des milieux continus. Aussi, à l'échelle nanométrique, selon la position choisie (la surface ou le centre de l'atome), différentes définitions de la taille du système peuvent être adoptées [Salah, 2018]. Il en résulte différents calculs de déformation.

Déformation d'une nanoparticule

Expérimentalement, les techniques d'indentation ont souvent été utilisées pour réaliser des essais de compression uni-axiales sur des nanoparticules, l'indenteur ayant un diamètre plus grand que celui des nanoparticules. Pour définir la déformation dans ces systèmes avec des tailles aussi petites, il est souvent fait référence au déplacement de l'indenteur qui est rapporté à la taille initiale du nanomatériau [Gerberich et al., 2003]. Les

autres définitions sont sujettes à discussions car les mobilités locales peuvent être complexes suivant les conditions.

Numériquement, la simulation d'un test de compression virtuel sur une nanoparticule pose certains problèmes. En plus de la difficulté qui peut résider dans la définition de la taille initiale de la nanoparticule, les modèles utilisés pour simuler la compression (structures atomiques, champs virtuels) peuvent aussi avoir une influence sur le comportement mécanique obtenu. La prise en compte ou non des effets attractifs et répulsifs peut induire des écarts dans les valeurs de déplacements calculées. En effet la prise en compte des effets attractives et répulsives entraîne la création d'une distance entre les plaques et les atomes de surface de la nanoparticule qui peut varier au cours de la compression et ainsi moduler le calcul de la déformation globale. Dans notre étude, il a été choisi, par souci de clarté, de prendre comme référence le centre des atomes de surface de la nanoparticule. Leurs déplacements sont utilisés pour le calcul de la déformation. Rappelons que seuls des tests de sollicitation uni-axiale sont conduits.

Contrainte axiale et contrainte sur un atome

Considérons notre système comme un ensemble de particules (atomes) interagissant via un potentiel d'interaction. On peut alors estimer la contrainte sur chaque atome, de même que la contrainte axiale, en considérant les contributions de l'énergie cinétique et des énergies inter et intra moléculaires. Le théorème du viriel, introduit en 1870 par Rudolf Clausius, relie les moyennes des énergies cinétiques et potentielles d'un système contenant plusieurs corps en interaction au cours du temps. À l'équilibre thermodynamique, on peut écrire la relation suivante pour l'ensemble des corps (atomes) considérés :

$$\left\langle \sum_{i=1}^N f_i * r_i \right\rangle = \left\langle \sum_{i=1}^N f_i^{int} * r_i \right\rangle + \left\langle \sum_{i=1}^N f_i^{ext} * r_i \right\rangle = -2K \quad (2.13)$$

Dans cette relation, f_i représentent les forces subies par les atomes i aux positions r_i et K l'énergie cinétique moyenne du système. Cette force totale peut être divisée en une somme de forces extérieures (dues à l'effet des parois de la boîte sur les particules par exemple), et intérieures (dues à l'interaction entre les particules). Ceci correspond à une énergie F_i pouvant être décomposée sous la forme d'une énergie externe F_i^{ext} et interne F_i^{int} :

$$F_i = F_i^{ext} + F_i^{int} = -2K \quad (2.14)$$

En considérant que les distances interatomiques sont faibles devant les dimensions de la boîte de simulation, le milieu peut être considéré comme étant continu. En appliquant le théorème de la divergence, l'énergie extérieure agissant sur le bord dv de surface dA et de normale n peuvent être réécrites comme suit :

$$F_i^{ext} = \left\langle \sum_{i=1}^N f_i^{ext} * r_i \right\rangle = - \iint_{\partial v} Pn * r dA = -P \int_v \nabla \cdot r dv = -3PV \quad (2.15)$$

En réinjectant la valeur de F_i^{ext} dans l'équation 2.14, on obtient l'expression de la pression P du système :

$$P = \frac{2K}{3V} + \frac{F_i^{int}}{3V}, \quad (2.16)$$

avec V le volume total du système. En considérant une interaction additive par paire (de chaque atome considéré i par rapport à son voisin j), et en utilisant la définition de l'énergie cinétique donnée par la théorie de la distribution des vitesses de Maxwell ($K = \frac{3}{2}K_B T$), la pression moyenne du milieu contenant N particules est obtenue par :

$$P = \frac{NK_B T}{V} + \frac{1}{3V} \left\langle \sum_{i \neq j} f_{ij}^{int} * r_{ij} \right\rangle \quad (2.17)$$

La pression axiale, qui est définie comme étant l'opposée de la contrainte suivant une direction α, β ($\alpha, \beta = x, y, z$), est calculée en utilisant le tenseur de l'énergie cinétique à la place de son expression issue de la théorie de distribution :

$$P_{\alpha, \beta} = -\sigma_{\alpha, \beta} = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_{i\alpha} v_{i\beta}}{V} + \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N r_{i\alpha} * f_{i\beta}^{int} \quad (2.18)$$

Le tenseur de contrainte sur chaque atome i dans la direction α, β est donné par :

$$\sigma_{\alpha, \beta}^i = \frac{-1}{V_i} \left[\sum_{j=1}^N r_{\alpha}^j f_{\beta}^{ij} + m_i v_{i\alpha} v_{i\beta} \right] \quad (2.19)$$

Dans cette relation, V_i représente le volume de l'atome i .

Intéressons-nous maintenant au calcul de la contrainte appliquée à notre système. Celle-ci requiert de définir au préalable la méthode selon laquelle sera effectuée la sollicitation. Ceci dépendra du type de système que nous étudierons (nanoparticule isolée où nanoparticule intégrée dans une matrice).

Pour comprimer une nanoparticule qui est un système isolé (système avec des conditions

libres aux bords), il est possible d'utiliser des plaques de compression formées par une structure atomique ou un champ de force virtuel. Pour estimer ensuite la contrainte appliquée, il est nécessaire d'appréhender l'évolution de la surface de contact pendant la sollicitation en compression.

Pour solliciter un système composé d'un renfort qui est inclus dans une matrice, il est souvent choisi d'utiliser une méthode de sollicitation par déformation. En effet, lorsque des conditions aux limites périodiques sont imposées (système non isolé), il n'y a pas de surface libre pour appliquer la sollicitation avec des plaques de compression.

Méthodes de sollicitation d'un système isolé : les nanoparticules

La modélisation par dynamique moléculaire classique s'effectue en considérant l'évolution d'un système qui est composé d'un ensemble de particules (atomes) contenues dans une boîte de simulation et qui interagissent entre elles via un potentiel d'interaction. Lorsque les dimensions de la boîte de simulation sont très grandes devant la taille de la nanostructure qui est contenue dans la boîte de simulation (nanoparticule par exemple), le système est dit isolé. Dans ce cas, deux nanostructures appartenant à deux boîtes de simulation voisines ne pourront pas interagir même si des conditions aux limites périodiques sont fixées (Figure 2.1a).

En dynamique moléculaire, pour décrire le comportement mécanique de certains nanomatériaux tels que les nanoparticules, des méthodes numériques similaires à celles conduites expérimentalement sont souvent mises en place. Du fait de la petite taille des nanoparticules, seuls des tests de compression sont effectués expérimentalement. Pour simuler ces tests numériquement, deux principales techniques sont utilisées : la sollicitation à l'aide de plaques formées par une structure atomique, et la sollicitation avec un champ de force virtuel.

Sollicitation avec des plaques formées par une structure atomique

La technique de sollicitation utilisée dans les articles [[Gerberich et al., 2003](#), [Mordehai et al., 2011](#), [Peng et al., 2010](#)] consiste à représenter la plaque de chargement par une structure atomique spécifique qui possède une rigidité beaucoup plus grande que celle de la nanoparticule (Figure 2.2A). Vis-à-vis de l'expérience, c'est un pis-aller. En effet, les mors de chargement sont constitués d'un métal très rigide dont les atomes vont interagir avec la nanoparticule. Certes il serait tentant de schématiser exactement ce dernier mais encore faudrait-il connaître le bon potentiel d'interaction. De plus, la position relative des atomes du mors avec la nanoparticule constitue un paramètre supplémentaire. Les mors

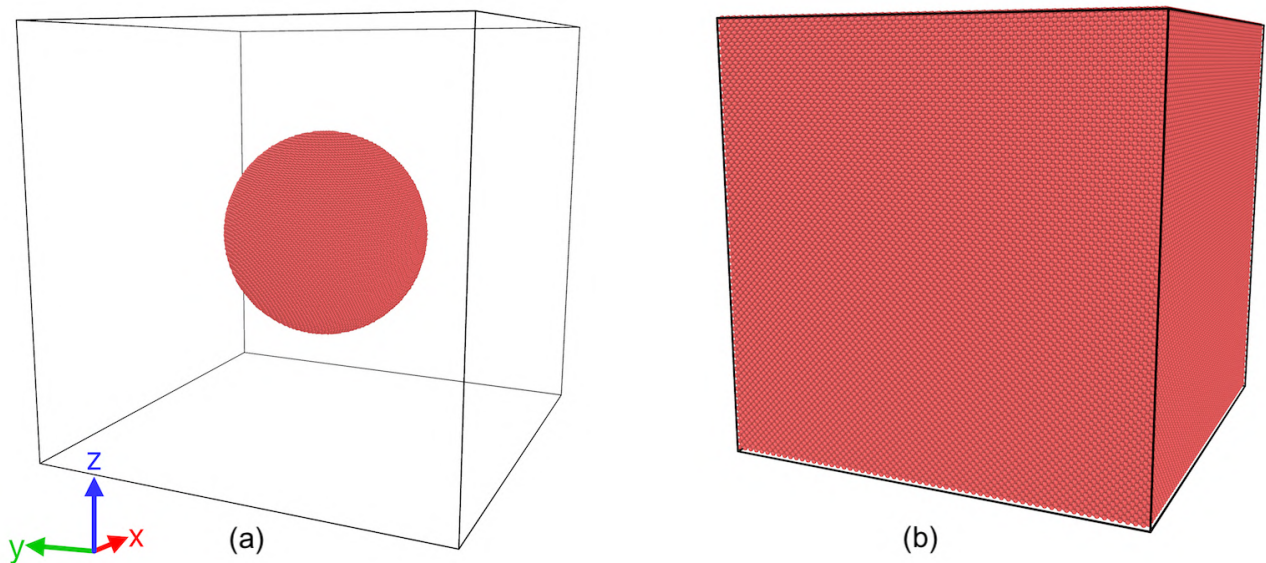


FIGURE 2.1 – Définition des systèmes étudiés dans le cadre de notre étude : (a) - système isolé (les dimensions de la structure (NP) sont plus petites que celles de la boîte); (b) - système non isolé (les dimensions de la structure et celles de la boîte sont similaires).

sont appréhendés par une structure très raide pour minimiser les paramètres définissant l'interaction. Dans ce cadre plusieurs possibilités se présentent. Tout d'abord, selon la disponibilité du potentiel, des simplifications peuvent être faites. Par exemple si le potentiel d'interaction permettant de décrire l'interaction entre les atomes de la plaque et ceux de la NP n'est pas disponible, le même matériau que constitue la nanoparticule peut être utilisé par simplification pour représenter les plaques de compression [Gerberich et al., 2003, Mordehai et al., 2011]. Dans ce cas une modification de l'énergie de cohésion de ces derniers doit être apportée de sorte que leur rigidité soit plus grande que celle de la nanoparticule. Si le potentiel est disponible, les plaques de compression sont représentées dans une position donnée avec une orientation cristallographique arbitraire. Ce qui nous amène dans tous les cas dans une configuration particulière peu représentative de la réalité. De plus, le temps de calcul est souvent très long du fait du nombre élevés d'atomes. Pour pallier à ce problème, dans les études récentes, un champ de force virtuel peut être avantageusement utilisé à la place de ces plaques de compression formées par des structures atomiques.

Sollicitation avec un champ de force virtuel

Le modèle de champ de force utilisé pour simuler l'effet des plaques de compression sur la nanoparticule est une fonction qui dépend de la position des plaques et de la position

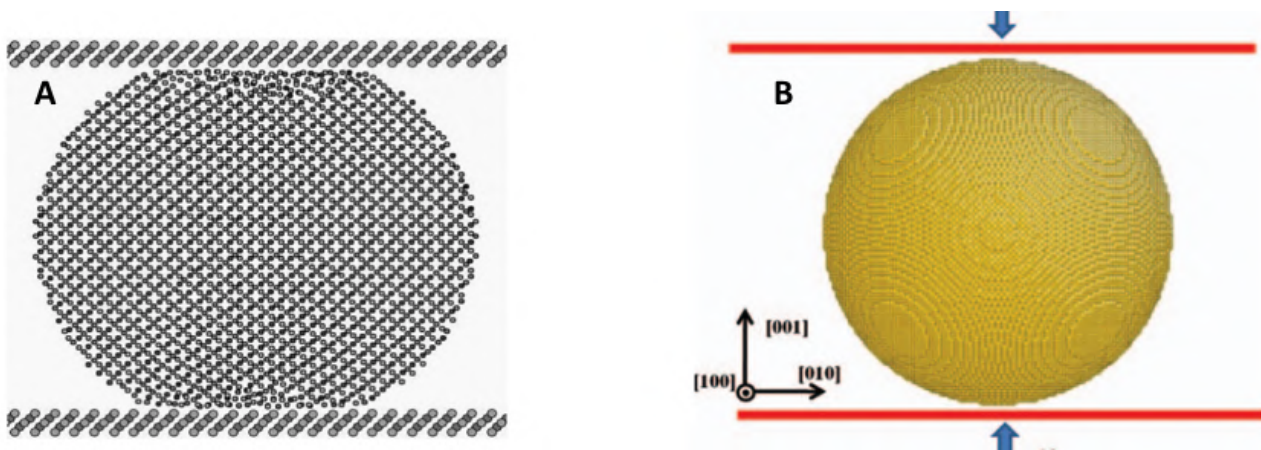


FIGURE 2.2 – Modélisation de la sollicitation mécanique d'une nanoparticule en DM : (A) modèle avec des plaques en structure atomique [Gerberich et al., 2003], (B) modèle avec utilisation d'un champ virtuel [Bian and Wang, 2013].

de chaque atome de la nanoparticule. L'utilisation de ce modèle permet une réduction du temps de calcul et constitue en quelque sorte une simplification schématisée très simplifiée par rapport aux structures atomiques de simulation de la compression. L'expression du champ de force virtuelle intégré dans le logiciel "LAMMPS" [Plimpton, 1995], et qui a été utilisé jusqu'à présent, est donnée en fonction de la position r_i d'un atome i par :

$$f(r - r_i) = -\alpha k * (r - r_i)^2 \quad (2.20)$$

Dans cette expression, r représente la position des plaques tandis que k est la rigidité des plaques virtuelles. Ce modèle utilisé largement dans la bibliographie [Bian and Wang, 2013, Salah et al., 2017, Kilymis et al., 2018] est une sorte de mur rigide qui n'agit que sur les atomes qu'il atteint ou qu'il dépasse ; ce qui signifie que les effets attractifs et répulsifs, respectivement à longues et courtes distances, ne sont pas pris en compte avec une telle approche. Seule la répulsion du contact est simulée. Il convient de se poser des questions sur la représentativité d'un tel modèle en le comparant avec une approche plus complète, apte à prendre en compte ces effets d'attraction et de répulsion, afin d'évaluer l'influence d'une description plus ou moins riche du champ de force sur le comportement mécanique.

Méthodes de sollicitation d'un système non isolé

Dans le cas où la boîte de simulation et la structure ont les mêmes dimensions et que des conditions aux limites périodiques sont fixées (ce qui est le cas dans notre étude), le système est non isolé (Figure 2.1*b*). Dans ce cas, pour déformer la structure, les dimensions de la boîte de simulation sont changées suivant la direction souhaitée, et la structure va s'adapter à la boîte de simulation qui change de taille en se basant sur le potentiel d'interaction. Dans le cadre de notre étude, une vitesse de déformation a été appliquée. Son expression est donnée par l'équation suivante :

$$\dot{\epsilon}(t) = \frac{L(t) - L_0}{L_0 * dt} \quad (2.21)$$

Dans cette expression, $\dot{\epsilon}(t)$ représente la vitesse de déformation, $L(t)$ la dimension de la boîte de simulation au cours de la déformation, L_0 la dimension initiale de la boîte de simulation, et dt l'incrément de temps écoulé pendant la déformation. La déformation est alors donnée par l'expression suivante :

$$\epsilon = \int_0^t \dot{\epsilon}(t) * dt = \frac{L(t) - L_0}{L_0} \quad (2.22)$$

Autrement dit, lorsqu'une vitesse de déformation de 0.1 est fixée par exemple, en considérant que l'unité de temps de la simulation est le picoseconde (*ps*), et que le temps écoulé (dt) pendant la déformation est de $1ps$, alors la déformation imposée sera égale à 10%.

Estimation de la surface de contact et calcul de la contrainte appliquée

Une des difficultés dans l'estimation des contraintes réside dans la définition des surfaces de contact. Pour des nanoparticules de forme cubique, la variation de leur surface de contact est moins importante comparée aux nanoparticules en forme de polyèdre de Wulff ou de forme sphérique dans lesquelles il est constaté une variation importante de leur surface de contact dès les premiers évènements de plasticité [Feruz and Mordehai, 2016, Salah et al., 2017]. Pour les phases élastique et plastique, les modèles hertzien et géométrique, respectivement ont déjà été utilisés pour estimer la surface de contact à partir du rayon de contact sur des nanoparticules sphériques de silicium [Gerberich et al., 2003]. Ces modèles issus de la mécanique des milieux continus sont moins adaptés si la taille du système devient trop petite. D'autres modèles pertinents pour les milieux discrets sont utilisés. Trois d'entre eux sont présentés dans ce qui suit et seront comparés par la suite pour estimer

l'impact que la définition de la surface de contact adoptée peut avoir sur le comportement mécanique.

Méthode de Vergeles

Pour utiliser cette méthode, il est tout d'abord nécessaire de définir une distance de contact (distance à partir de laquelle les plaques de compression et les atomes de surface de la nanoparticule sont considérés en contact). Connaissant la distance de contact, toutes les positions des atomes en contact avec les plaques de compression, de même que le centre de masse du groupe d'atomes collectés, sont identifiés.

Le carré du rayon de contact a^2 est ainsi estimé comme étant la moyenne par rapport au centre de masse de toutes les positions dans le plan de la compression [Vergeles et al., 1997]. Son expression est donnée par :

$$a^2 = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^N [(x_i - x_m)^2 + (z_i - z_m)^2] \quad (2.23)$$

N est le nombre total d'atomes dans le plan de la compression x, z de centre de masse de coordonnées x_m et z_m .

Évaluation par sommation des sections des atomes

Une autre méthode consiste, une fois que la distance de contact et le nombre d'atomes en contact avec les plaques de compression sont connus, à calculer la section de chaque atome pour en déduire la surface de contact qui sera calculée via la somme de toutes les sections de tous les atomes [Mo et al., 2009] :

$$S_t = N_{at} * A_{at} \quad (2.24)$$

A_{at} est la surface d'un atome, N_{at} représente le nombre d'atomes total.

Évaluation par triangulation de Delaunay

Avec cette autre méthode, le point de départ est également la définition de la distance de contact et de la collection des positions des atomes dans le plan de contact.

Connaissant les positions des atomes, l'étape suivante consiste à mailler la surface par triangulation de Delaunay [Kilymis et al., 2018].

La surface de chaque triangle est ensuite calculée. Puis la surface totale est obtenue en

sommant les surfaces de tous les triangles selon l'expression :

$$S_t = \sum_{i=1}^N S_i \quad (2.25)$$

S_i est la surface de chaque triangle et N le nombre total de triangles. Une fois que la surface de contact S et la force appliquée F sont connues, la contrainte appliquée est estimée par $\sigma = F/S$.

Pour mesurer l'impact que peut avoir l'écart issu de l'estimation des valeurs de la surface de contact sur le calcul de la contrainte appliquée, des comparaisons seront faites dans la section 2 sur les comportements obtenus en utilisant les méthodes de Vergeles et de Delaunay.

ANALYSE CRITIQUE DE LA REPRÉSENTATIVITÉ PHYSIQUE DE LA MODÉLISATION DE LA SOLLICITATION MÉCANIQUE DES NANOPARTICULES EN DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE

Par rapport aux matériaux massifs qui ont un rapport *surface/volume* moins élevé, les nanoparticules (NPs) ont fait l'objet de plusieurs études afin de comprendre les changements observés sur le comportement mécanique lorsque la taille du matériau devient nanométrique. En 2003, [Gerberich et al., 2003] ont effectué des essais de compression sur des nanoparticules de Si et ont remarqué une concentration de contraintes sous les zones de contact où l'on note la nucléation des premières dislocations. Depuis, des questions sur l'existence ou non d'un effet de taille à cette échelle ont été abordées. Cependant, les résultats obtenus semblent contradictoires. En 2010, [Nowak et al., 2010] ont souligné un effet de taille (une augmentation de la résistance des NPs avec la diminution de leur diamètre) sur des NPs de silicium quasi-sphériques, tandis que [Wagner et al., 2015] n'ont souligné aucun effet de taille sur les nano-cubes de silicium. La présence d'effet de taille dans les nanoparticules en formes de polyèdres de Wulff a été à nouveau confirmée par [Feruz and Mordehai, 2016]. Dès lors, la question de l'existence d'une éventuelle relation entre le comportement observé et la géométrie des NPs étudiées s'est posée. En 2017, [Salah et al., 2017] ont montré que le comportement lié à un effet de taille est plutôt causé par la géométrie de la surface externe. Les études ont été menées sur des NPs d'aluminium de forme sphérique. La même année, les travaux [Amodeo and Lizoul, 2017]

indiquent que la géométrie de la surface externe est déterminante dans la description des premiers événements de plasticité. Ils ont montré que l'arrondissement des bords et des sommets des NPs cubiques de Ni_3Al entraîne une augmentation de leur rigidité et de leur résistance. Ils ont également montré qu'à partir d'un certain coefficient d'arrondissement, il peut se produire un basculement d'un mode de déformation hétérogène à un mode de déformation homogène. En 2018, des études plus approfondies sur les effets de taille et de forme ont été réalisées par [Kilymis et al., 2018]. Ceux-ci indiquent que les mécanismes de plasticité sont régis par la géométrie de la surface et la contrainte de cisaillement générée pendant le chargement élastique. Ces deux propriétés sont liées à la forme de la nanoparticule. Ils ont observé qu'un effet de taille est présent dans le polyèdre de Wulff mais absent dans les nano-sphères et les nano-cubes. Ils en déduisent alors que même s'il y a un effet de taille, celui-ci dépend de la forme de la nanoparticule.

Les questions de l'existence ou non d'un effet de taille et/ou de géométrie de surface ont donc fait l'objet de plusieurs études. En revanche, la représentativité physique du modèle de champ de force utilisé pour comprimer ces NPs n'a pas véritablement été questionnée. L'interaction entre le champ de force et la nanoparticule se fait au travers de la surface de contact, il n'est donc pas possible de conclure en se basant uniquement sur le lien entre les mécanismes observés et la géométrie de surface. Les moyens de chargement peuvent influencer sur le comportement mécanique et/ou sur le mécanisme de plasticité. Il est donc important de mener une étude pour évaluer leurs impacts.

Rappelons brièvement les deux méthodes jusqu'ici utilisées pour simuler la compression des nanoparticules. Dans les premières études numériques ([Gerberich et al., 2003, Mordehai et al., 2011]), des plaques de compression formées par une structure atomique étaient généralement utilisées. Cependant, ces plaques de compression modélisées sans défaut, placées dans une position spécifique, avec une orientation cristallographique spécifique, nous amène dans une configuration très particulière qui n'est pas représentative de la réalité, il est important de le souligner à nouveau. De plus, sachant que modéliser les plaques de compression avec une structure atomique augmente significativement le temps de calcul, des modèles plus simples ont par la suite adoptés.

L'un d'entre eux utilisé jusqu'à présent par [Bian and Wang, 2013, Feruz and Mordehai, 2016, Salah et al., 2017, Kilymis et al., 2018] consiste à remplacer les plaques en structure atomique par un champ de force virtuel (Figure 2.2) simulant une simple répulsion à contact (tel un mur rigide). Cette hypothèse du champ de force rigide n'en n'est pas plus réaliste, puisque la rigidité doit dépendre a minima du couple d'atomes qui entrent

en contact. De ce fait, le champ décrit peut-être plus ou moins rigide et donc plus ou moins représentatif de la réalité. En effet, la réalité physique de cette interaction est attraction-répulsion. Il convient donc de d'évaluer l'influence d'une modélisation un peu plus représentative de l'interaction sur le comportement mécanique obtenu.

PROPOSITION D'AMÉLIORATION DE LA MÉTHODE DE MODÉLISATION

Afin de répondre à notre interrogation, trois modèles de champ de force ont été testés. Le modèle classique de champ de force utilisé par [Feruz and Mordehai, 2016, Salah et al., 2017, Amodeo and Lizoul, 2017, Kilymis et al., 2018], un modèle de champ de force ayant un effet attractif et répulsif à longue et courte distance respectivement, et un modèle de champ de force qui ne contient qu'une partie répulsive à courte distance. Tous les modèles de champ de force ont été testés sur des nano-sphères d'aluminium et de nickel, de différentes tailles et orientations cristallographiques.

Description de la méthodologie et des champs de force utilisés

Méthodologie

Des empilements atomiques, respectant la structure cristallographique *CFC*, ont été créés selon six orientations cristallographiques ($[010]$, $[110]$, $[111]$, $[120]$, $[211]$ et $[123]$) et avec un paramètre de maille de 4.05 \AA , afin d'avoir une structure représentative de l'aluminium massif. Des nanosphères d'aluminium de 20 nm de diamètre ont ensuite été découpées pour chaque orientation cristallographique. Pour étudier l'effet de la taille et/ou de la géométrie de surface selon le modèle de champ de force, des nano-sphères d'aluminium supplémentaires avec des diamètres de 4 nm et 8 nm ont été générées selon la direction $[010]$. Pour analyser l'impact de l'effet du matériau, des nanoparticules de nickel (Ni) de 20 nm de diamètre ont été également générées selon les directions $[010]$ et $[211]$ avec un paramètre de maille de 3.52 \AA .

Pour décrire le comportement mécanique, le potentiel semi-empirique "Embedded Atom Method" (*EAM*) développé par [Mishin et al., 1999; 2001] a été utilisé dans les simulations. Ce potentiel, largement employé dans la littérature [Spearot et al., 2007, Brochard et al., 2010, Salah et al., 2017], permet de reproduire avec une bonne précision certains défauts tels que les défauts d'empilement, la nucléation et la propagation des dislocations.

Avant les tests de compression, l'énergie du système est minimisée jusqu'à 10^{-8} en utilisant la méthode du gradient conjugué. L'ensemble du système est équilibré à une température de 10K à l'aide du thermostat Nose-Hoover [Hoover, 1985] en utilisant l'ensemble *NVT* (le nombre d'atomes, le volume et la température sont maintenus constants). Toutes les simulations effectuées à 10K ont également été effectuées à température ambiante (300K) avec différentes graines aléatoires. Des conditions aux limites libres ont été appliquées et un pas d'intégration de 1fs a été fixé dans nos calculs.

Afin d'évaluer les contraintes, deux méthodes ont été utilisées pour calculer la variation de la surface de contact lors des essais de compression. La première méthode, développée par Vergeles (équation 2.23) [Vergeles et al., 1997], a été utilisée dans [Salah et al., 2017]. La seconde méthode, qui a été utilisée par [Kilymis et al., 2018], est basée sur la triangulation de Delaunay du groupe d'atomes qui est en contact avec des plaques virtuelles (équation 2.25). Les simulations ont été effectuées à l'aide du code "LAMMPS" [Plimpton, 1995]. Les visualisations ont été réalisées avec l'utilisation des logiciels Ovito [Stukowski, 2009] et AtomViewer [Begau et al., 2011; 2012].

Description des modèles de champ de force

Les trois modèles de champ de force virtuels testés dans cette étude sont présentés plus en détail.

Le premier largement utilisé dans la littérature [Feruz and Mordehai, 2016, Salah et al., 2017, Amodeo and Lizoul, 2017, Kilymis et al., 2018] est défini par l'expression suivante :

$$f_i(r_i - r) = -\alpha k(r_i - r)^2 \quad (2.26)$$

Dans cette expression, $\alpha = \pm 1$ indique la direction de compression, $k = 1000eV/\text{\AA}^3$ est un paramètre libre lié à la rigidité des plaques de compression, r représente leurs positions et r_i correspond à la position du i ème atome dans la nanosphère.

Ce modèle ne contient qu'une "partie répulsive au contact". Cela signifie que lors des essais de compression, ce champ de force n'agit que sur les atomes de la nanoparticule qu'il atteint ou dépasse. La variation de ce champ de force subie par un atome en fonction de la distance entre celui-ci et la plaque considérée est représentée par la courbe verte sur la Figure 2.3. Ce modèle sera appelé (*IFF*) (pour *Initial Force Field*).

Le deuxième modèle de champ de force utilisé dans cette étude a été obtenu à partir d'un potentiel de type paire développé par Morse [Morse, 1929b], pour décrire l'interaction entre les atomes de la plaque de compression (le carbone dans cette étude) et ceux des

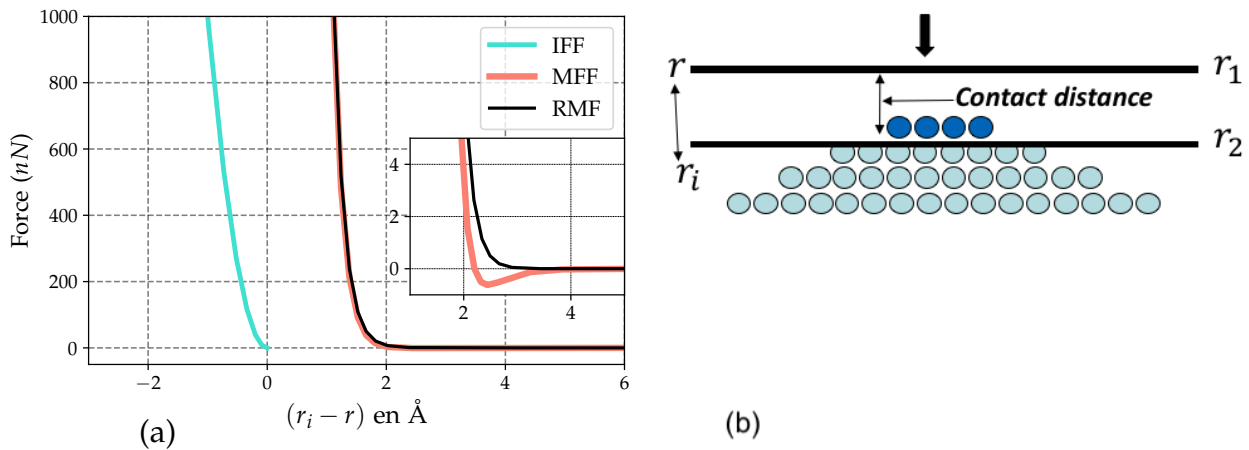


FIGURE 2.3 – (a)-Modèles de champ de force : l'IFF (Initial Force Field) est le modèle de champ de force largement utilisé dans la bibliographie [Feruz and Mordehai, 2016, Salah et al., 2017, Amodeo and Lizoul, 2017, Kilymis et al., 2018]. Le MFF (Morse Force Field) est le modèle de champ de force issu de l'énergie d'interaction du champ de Morse; il contient une partie attractive et une partie répulsive. Le RMF (Répulsive Morse Force Field) représente la partie répulsive du MFF. L'insert indique les parties attractives et répulsives du MFF. (b)-Représentation du contact entre les plaques de compression et les premiers couches atomiques de la nano-sphère : r_1 et r_2 représentent les positions des plaques de compression avant et après dépassement de la première couche atomique (en bleue) respectivement, r_i représente la position d'un atome pris dans la nanoparticule.

nanoparticules (l'aluminium et le nickel). Il sera appelé *MFF* (pour *Morse Force Field*). Ce potentiel de Morse est également utilisé dans les études de nano-indentation [Fang and Wu, 2008, Peng et al., 2010, Imran et al., 2012]. Contrairement à l'IFF, le *MFF* contient une partie attractive à longue distance et une partie répulsive à courte distance. Il est raisonnable d'affirmer qu'il est physiquement plus représentatif que l'IFF. L'énergie E_m et le champ de force F_m du *MFF* sont donnés par les expressions suivantes :

$$E_m = D[e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)}] \quad (2.27)$$

$$F_m = 2\alpha D[e^{-\alpha(r-r_0)} - e^{-2\alpha(r-r_0)}] \quad (2.28)$$

Dans ces expressions, D représente l'énergie de cohésion, r_0 la distance d'équilibre et α le module d'élasticité. La distance de coupure a été prise égale à 6 \AA . Les paramètres utilisés dans les simulations sont indiqués tableau 2.5. Ils sont issus respectivement de [Peng et al., 2010] pour l'aluminium et de [Imran et al., 2012] pour le nickel. L'évolution du champ de force subi par un atome en fonction de la distance entre celui-ci et une plaque de compression est représentée en saumon à la Figure 2.3.

Le dernier champ de force testé dans cette étude représente la partie répulsive du *MFF*. Contrairement à ce dernier à l'IFF, ce champ de force ne contient pas de partie attractive à longue distance et contient une partie répulsive à courte distance. Il sera appelé *RMF*

Matériaux	$D(eV)$	$r_0(\text{Å})$	$\alpha(\text{Å}^{-1})$
<i>Aluminium</i>	0.28	2.20	2.78
<i>Nickel</i>	1.0094	2.56	1.9875

TABLE 2.5 – Valeurs des paramètres utilisés pour l'étude du comportement mécanique des nanoparticules d'Al et de Ni avec le MFF et le RMF; les paramètres sont issus de [Peng et al., 2010] et [Imran et al., 2012], respectivement pour l'Al et le Ni.

(pour *Repulsive Morse Force field*) et est représenté sur la Figure 2.3 par la courbe noire.

Afin de prendre en compte l'effet des parties attractives et répulsives dans le comportement mécanique, avant les essais de compression, les plaques de compression ont été placées à 7 Å de la surface des premières couches de la nanoparticule avant d'être poussées vers la nano-sphère avec une vitesse de déformation constante de $10^9 s^{-1}$.

Présentation des résultats sur l'impact du modèle de champ de force sur le comportement mécanique

Pour étudier l'influence des modèles de champ de force sur le comportement mécanique des nanoparticules d'aluminium et de nickel, une nano-sphère d'aluminium de taille 20nm a été comprimée en utilisant les modèles *IFF*, *MFF* et *RMF*, selon six orientations cristallographiques ([010], [110], [111], [120], [211] et [123]). Une nano-sphère de nickel de même taille (20nm) est ensuite comprimée suivant les directions [010] et [211]. La Figure 2.4 montre les courbes de chargement (force-déplacement) dans les directions [010], [111], [123] et [211], obtenues en sollicitant les nanoparticules d'aluminium.

Comportements observés dans les direction [010], [111] et [123]

La Figure 2.4a, montre les courbes forces-déplacements obtenues en effectuant des tests de compression dans la direction [010], sur une nanosphère de taille 20nm, en utilisant les trois modèles de champ de force. Au début du chargement, une pente négative a été observée sur la courbe obtenue avec le *MFF*. Ce comportement est provoqué par la partie attractive du *MFF*. Il n'est pas observé avec les courbes obtenues avec l'*IFF* et a fortiori avec le *RMF*. Le niveau de déplacement à partir duquel le point de nucléation (point à partir duquel les premières dislocations sont observées) est inférieur avec le *MFF* (2.15 Å) comparativement à celui obtenu avec l'*IFF* (5.41 Å) et le *RMF* (5.98 Å). Cependant, les comportements mécaniques, de même que les mécanismes de plasticité (Figure 2.5) observés pour tous les modèles restent similaires.

La comparaison de l'évolution des mécanismes de plasticité obtenus avec les modèles

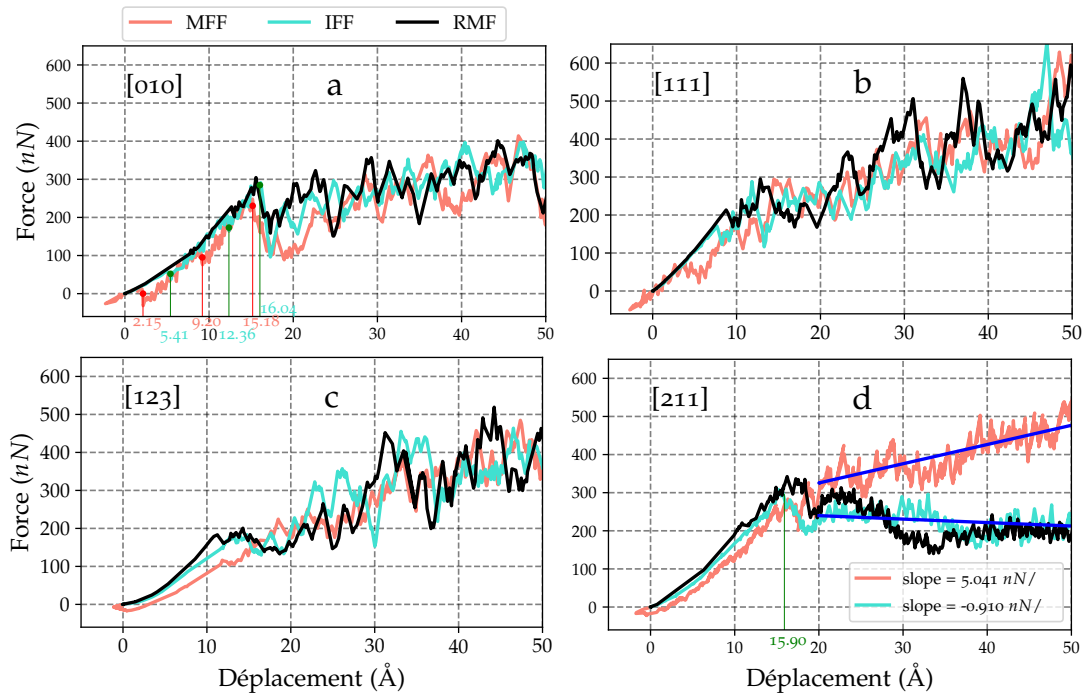


FIGURE 2.4 – Influence du modèle de champ de force sur le comportement mécanique : courbes force-déplacement obtenues en effectuant des tests de compression avec les trois modèles de champ de force (IFF, MFF et RMF) sur une NP de 20nm de taille selon les directions a-[010], b-[111], c-[123] et d-[211].

de champ de force a été effectuée en partant de configurations similaires (ici le point de nucléation), et en faisant varier le chargement avec le même pas de déplacement pour tous les modèles de champ de force (Figure 2.5). Dans la direction [010], du fait de l'organisation particulière (en forme escalier) des couches atomiques de la NP, il est souvent observé un mécanisme de plasticité assez riche, marqué par la formation de deux pyramides [Bian and Wang, 2013, Salah et al., 2017]. Le début de la plasticité est marqué, pour tous les modèles, par la génération de quatre dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$ à partir de la surface de contact qui vont s'intercepter pour former une première pyramide composée de dislocations de type sessile $1/3 \langle 100 \rangle$ (Figure 2.5a, 2.5e et 2.5i). En augmentant le niveau de chargement avec un incrément de déplacement de 6.95 \AA , la formation d'une seconde pyramide est observée avec l'IFF (Figure 2.5b) et le RMF (Figure 2.5j). La formation d'une seconde pyramide est également observée avec le MFF, mais à un niveau de déplacement de 9.28 \AA (Figure 2.5g), soit un incrément de déplacement de 7.13 \AA . Cela signifie que le mécanisme de plasticité observé avec le MFF enregistre un retard de 0.18 \AA par rapport aux modèles IFF et RMF. Contrairement à ces derniers (IFF et RMF), on ne remarque pas, avec le MFF, de petites dissociations de dislocations partielles de Shockley dans la base de la seconde pyramide formée. Si l'incrément

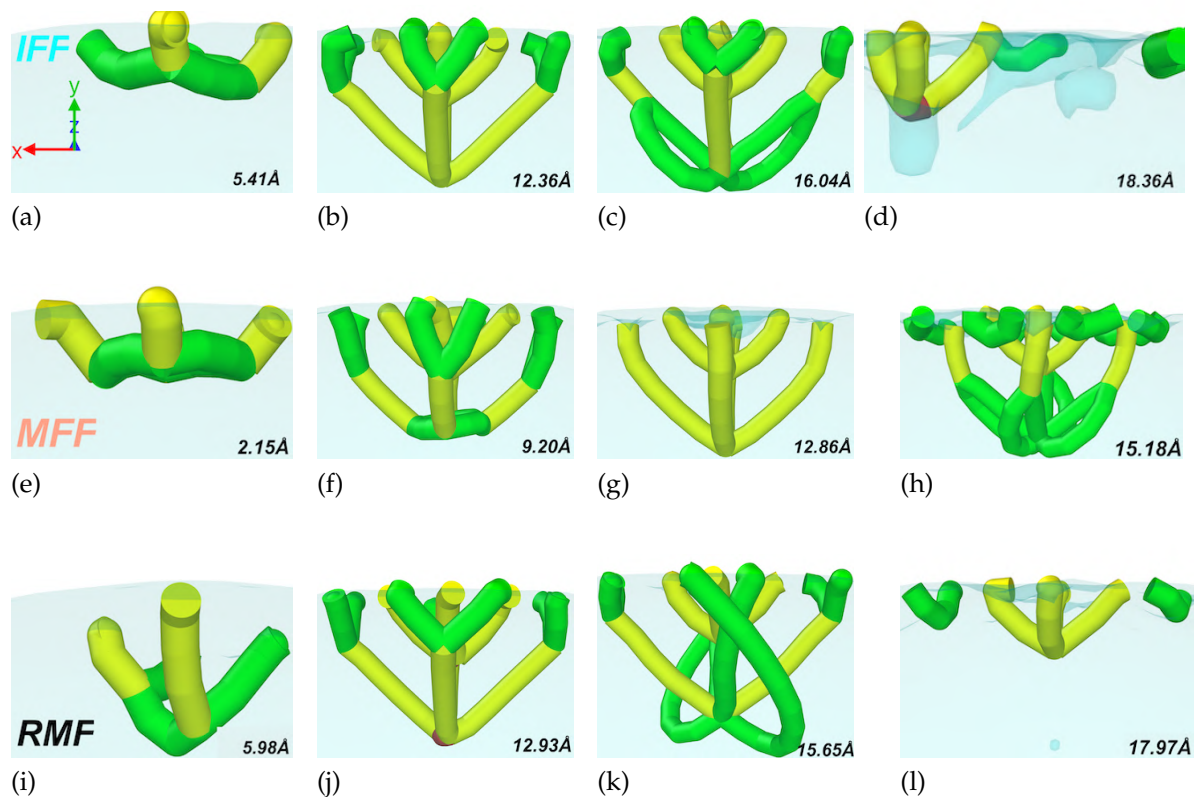


FIGURE 2.5 – Influence du modèle de champ de force sur le comportement mécanique : l'évolution du mécanisme de plasticité observée en effectuant des tests de compression sur une NP d'Al de 20nm de taille, à 10K et 300K, suivant la direction $[010]$ en utilisant les trois modèles de champ de force (*IFF*, *MFF* et *RMF*) (verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, marron : sessiles de type $1/3 \langle 101 \rangle$).

ment de chargement est augmenté jusqu'à 10.63 \AA , soient des amplitudes de chargement de 16.04 \AA et 16.61 \AA , respectivement pour le *IFF* et le *RMF*, la destruction des secondes pyramides formées avec ces deux modèles se produit par dissociation des dislocations (Figure 2.5c et 2.5k). La seconde pyramide formée avec le *MFF* sera détruite plus tard à un niveau de chargement de 15.18 \AA (Figure 2.5h) soit un incrément de chargement de 13.03 \AA . Cela signifie que le *MFF* enregistre à nouveau des retards de 2.4 \AA et 3.36 \AA , respectivement par rapport aux modèles *IFF* et *RMF* dans l'évolution de son mécanisme de plasticité. On observe aussi que, si la destruction des secondes pyramides formées avec les modèles *IFF* et *RMF* s'effectue par simple dissociation de dislocations, avec le *MFF*, cette destruction s'accompagne de la nucléation d'autres dislocations partielles de Shockley depuis la surface de contact. Ces dislocations générées et celles résultant de la destruction de la seconde pyramide, peuvent s'intersecter.

En réalisant des tests de compression à l'aide des trois modèles de champ de force dans les

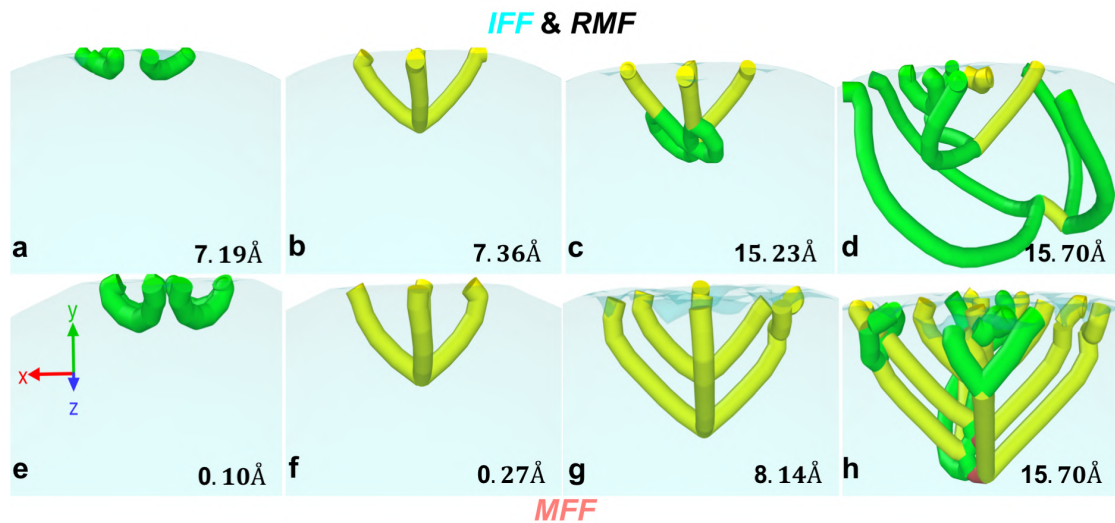


FIGURE 2.6 – Impact du modèle de champ de force sur le comportement mécanique : l'évolution du mécanisme de plasticité observée en effectuant des tests de compression sur une NP de Ni de 20nm de taille, à 10K et 300K, suivant la direction $[010]$ en utilisant les trois modèles de champ de force (*IFF*, *MFF* et *RMF*) (verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, marron : sessiles de type $1/3 \langle 101 \rangle$).

directions $[111]$ et $[123]$ (Figure 2.4b, 2.4c), des comportements mécaniques similaires ont été également observés. Des mécanismes de plasticité similaires, marqués par des retards du comportement obtenu avec le *MFF* du fait de sa partie attractive, ont également été observés (le lecteur est renvoyé à la section A de l'annexe pour plus de détails).

Avec les nano-sphères de Ni, les comportements mécaniques obtenus en réalisant des tests de compression dans la direction $[010]$, avec les trois modèles de champ de force sont globalement similaires (ref. section A de l'annexe). Toutefois, si les mêmes mécanismes de plasticité ont été constatés avec les modèles *IFF* et *RMF*, le début du mécanisme de plasticité observé avec le *MFF* est quelque peu différent (Figure 2.6). L'analyse des mécanismes montre qu'au début de plasticité, contrairement aux modèles *IFF* et *RMF* avec lesquels une seule pyramide se forme, il est observée la formation de trois pyramides avec le modèle *MFF*. À notre connaissance, la formation de trois pyramides selon cette direction dans les nano-sphères de structure *CFC* est rapportée pour la première fois. Avec l'augmentation du chargement, pour tous les modèles, l'apparition d'un mode déformation par maclage est constaté, comme montré dans [Salah, 2018].

Comportements observés dans la direction $[211]$

Dans cette direction, des différences beaucoup plus marquées ont été observées entre les comportements mécaniques obtenus en réalisant des essais de compression à l'aide

des trois modèles de champ de force. Les courbes force-déplacement sont données à la Figure 2.4d. L'évolution du mécanisme de plasticité est également représentée à la Figure 2.7. Malgré l'effet attractif du modèle *MFF*, les phases élastiques restent similaires pour les modèles *IFF* et *MFF*. Cependant, en comparant les phases plastiques, un durcissement plus prononcé est observé sur la courbe obtenue avec le *MFF*, par rapport aux courbes obtenues avec les modèles *IFF* et *RMF*.

Afin de comparer l'évolution des mécanismes de plasticité, des niveaux de déplacement similaires sont considérées pour tous les modèles. En raison de la forme de la géométrie de surface, dans cette direction, le mécanisme de plasticité est souvent dominé par du maillage [Salah, 2018, Bian et al., 2018b]. L'évolution du mécanisme de plasticité observée en faisant des tests de compression commence à une amplitude de chargement de 15.90 Å pour l'*IFF*. À ce stade, des dislocations partielles de Shockley glissant dans des plans $\{111\}$ sont nucléées (Figure 2.7a). Ces dislocations laissent derrière elles des défauts d'empilement étendus favorisant la création de joints de macle. Ce début de nucléation de dislocations est marqué par une chute observée sur la courbe. Un mécanisme de plasticité similaire est observé avec le *RMF* (Figure 2.7g).

Avec le *MFF*, même si la chute observée à une amplitude de chargement de 15.29 Å est moins importante que celles obtenues avec l'*IFF* et le *RMF*, le mécanisme de plasticité observé reste similaire à ceux obtenus avec les modèles *IFF* et *RMF* (Figure 2.7d). Si maintenant l'amplitude de chargement augmente en passant à environ 25.51 Å, on observe, pour tous les modèles, la nucléation d'autres dislocations. Ces dislocations glissent sur des plans adjacents aux défauts d'empilement préexistants. Cela entraîne la migration des joints de macle vers le centre de la nano-sphère (Figures 2.7b, 2.7e et 2.7h). Il faut noter qu'avec l'*IFF* et le *RMF*, cette migration de joints de macle vers le centre de la nanoparticule est marquée par de petites variations, contrairement au *MFF* avec lequel un durcissement prononcé a été observé. Plus le niveau de chargement augmente, plus l'écart entre les comportements mécaniques obtenus d'une part avec le *MFF*, d'autre part avec les modèles *IFF* et *RMF*, augmente. La moyenne des variations des courbes pendant le chargement plastique est représentée par la ligne bleue tracée à la Figure 2.4d. La pente de cette droite est de $-0.91 \text{ nN}/\text{Å}$ pour les modèles *IFF* et *RMF*, et de $5.041 \text{ nN}/\text{Å}$ pour le *MFF*. La pente enregistrée avec le *MFF* est donc bien supérieure à celles obtenues respectivement avec les modèles *IFF* et *RMF*.

En comparant les configurations observées à des niveaux de déplacement similaires, trois différences supplémentaires peuvent être notées.

- À 60.00 Å, un effet de retard est observé. Il se caractérise par des distances plus

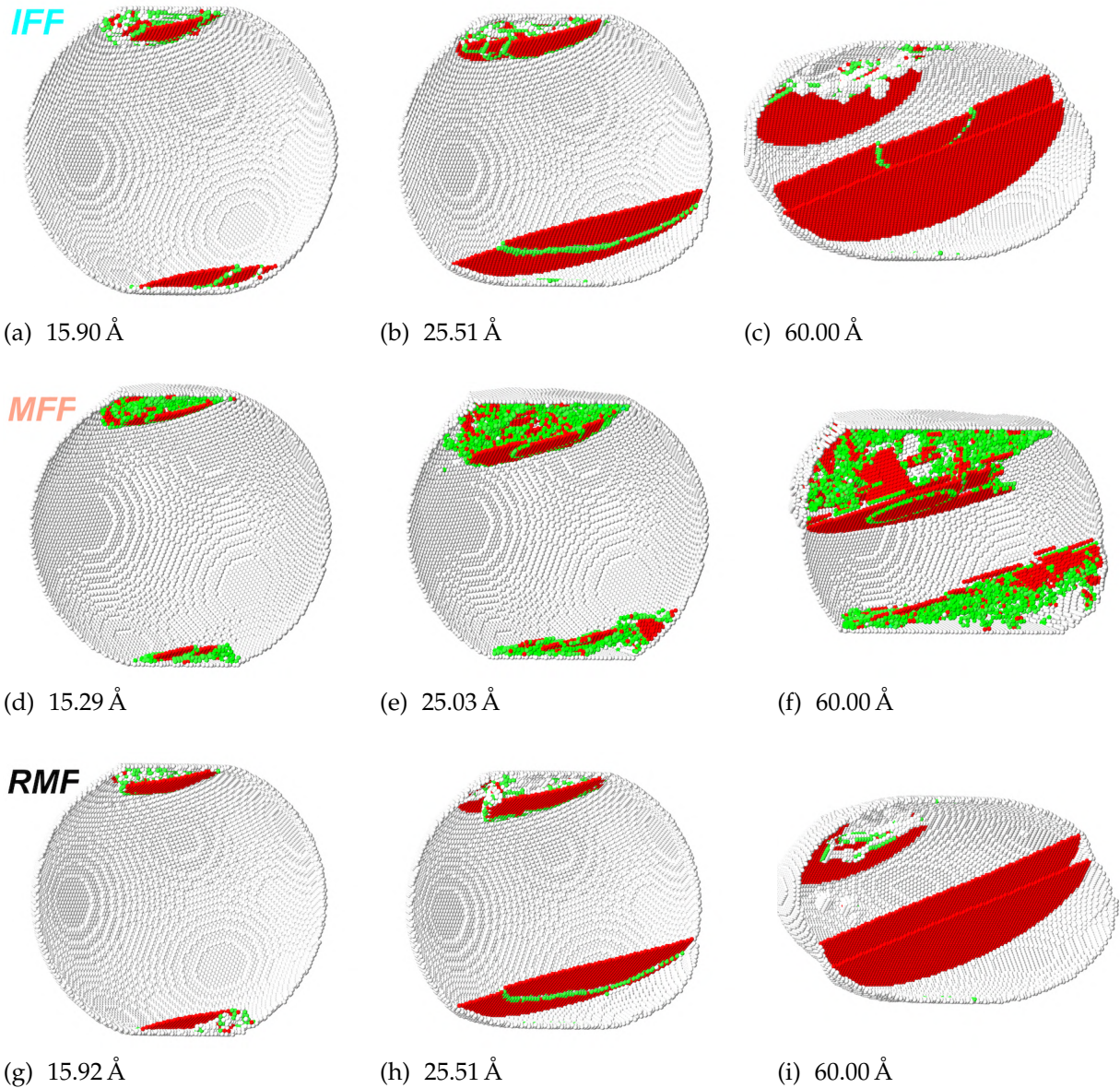


FIGURE 2.7 – Influence du modèle de champ de force sur le comportement mécanique : l'évolution des mécanismes de plasticité obtenus en effectuant des tests de compression avec les trois modèles de champ de force (IFF, MFF et RMF) sur une NP de 20nm de taille, à 10K et 300K, suivant la directions $[211]$ (atomes verts : dislocations, atomes blancs : surface, atomes rouges : défauts d'empilement).

petites entre les joints de macles dans les nano-sphères comprimées avec les modèles *IFF* et *RMF* que celle comprimée avec le *MFF*.

- Une forêt de dislocations a été observée à l’arrière les joints de macle lors de leur migration vers le centre de la NP dans le cas d’une compression modélisée par le *MFF*. À l’inverse, dans le cas des nanoparticules comprimées avec les modèles *IFF* et *RMF*, un réseau parfait s’est formé derrière les joints de macle lors de leur migration vers le centre de la NP.
- De plus, la forme de la nanoparticule lors des tests de compression n’est pas la même selon le modèle. Si une forme arrondie a été observée avec les NPs comprimées avec les modèles *IFF* et *RMF*, une surface plane au niveau des zones de contact a plutôt été observée avec la NP comprimée avec le *MFF*.

Des mécanismes similaires ont été obtenus en effectuant des tests de compression sur des nano-sphères de nickel dans la direction $[211]$. Les résultats sont présentés dans la section A de l’annexe.

Comportements observés dans les direction $[110]$ et $[120]$

Des tests de compression effectués dans ces directions, avec différents grains aléatoires, à l’aide du modèle *IFF*, montrent deux comportements mécaniques différents (Figure 2.8) selon la graine aléatoire. Dans la direction $[110]$, le premier mode de déformation (*M1-110*) est dominé par du glissement de dislocations qui sont générées à partir des surfaces de contact au début de la plasticité (Figure 2.9a). Si l’amplitude du chargement augmente, ces dislocations se déplacent vers les surfaces libres où elles pourront s’échapper. Ce mouvement de glissement des dislocations est marqué par les chutes observées dans la courbe force-déplacement représentée sur la Figure 2.8a (*IFF-Mode1* est le *M1-110* obtenu avec l’*IFF*). Le même mode de déformation dans cette direction est aussi obtenu avec le *MFF*. Ce type de déformation a été trouvé dans les nanoparticules de cuivre [Bian et al., 2018b] selon la direction $[110]$. Néanmoins, à une amplitude de chargement proche de 29.02 \AA , la formation de petits joints de macle a été observée. Ces petits joints de macles seront supprimés par la suite par des dislocations glissant dans leurs plans adjacents lorsque l’amplitude de chargement augmente (Figures 2.9b et 2.9c). Le second mode de déformation (*M2-110*) observé dans la direction $[110]$ est dominé par un mode de déformation par maclage (Figure 2.9d, 2.9e et 2.9f). Au début de la plasticité, les dislocations générées à partir de la surface de contact glisseront vers le centre de la NP, laissant derrière elles des défauts d’empilement (Figure 2.9d). Lorsque l’amplitude du chargement augmente,

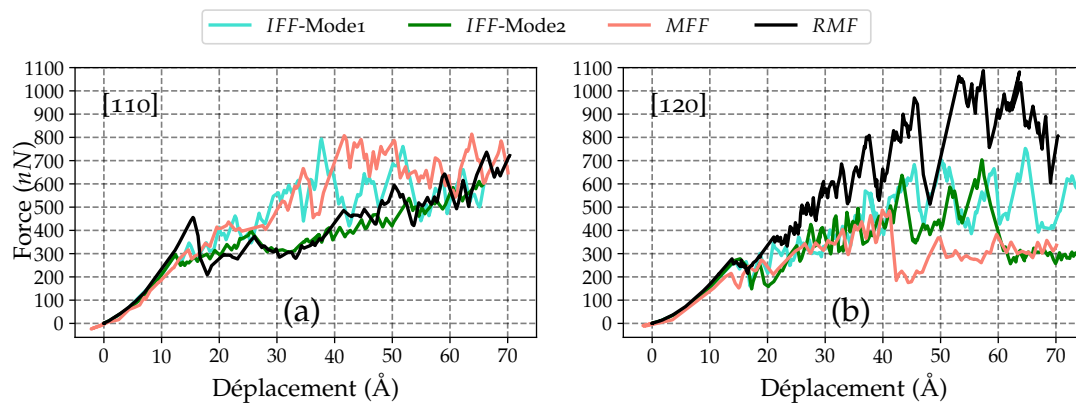


FIGURE 2.8 – Impact du modèle de champ de force et de la graine aléatoire (pour l'IFF) : comportements mécaniques obtenus en effectuant des tests de compression sur une NP de 20nm de taille suivant les directions [110]-(a) and [120]-(b). (IFF-Mode1 and IFF-Mode1 correspond aux deux modes de déformation observés en effectuant des tests de compression avec le IFF en utilisant deux graines aléatoires différentes)

ces défauts d'empilement vont s'étendre conduisant à la formation d'un joint de macle qui va se déplacer vers la surface de contact opposée (Figures 2.9e et 2.9f). Du fait de ce mode de déformation, les chutes observées sur la courbe force-déplacement, donnée par la Figure 2.8a (IFF-Mode2 est le M2-110 obtenu avec l'IFF, le même mode de déformation dans cette direction est aussi obtenu avec le RMF) sont inférieures à celles observées sur la courbe obtenue avec le M1-110 (Figure 2.8a (IFF-Mode1)).

Dans la direction [120], le mécanisme de plasticité du premier mode de déformation (M1-120), comme le (M1-110), est gouverné par du glissement de dislocations. Ces dislocations sont générées à partir des surfaces de contact et vont se déplacer vers les surfaces libres de la NP où elles s'échappent (Figures 2.10a, 2.10b et 2.10c). Dans le second mode de déformation (M2-120), il existe également deux types de mode de déformation en fonction de l'amplitude du chargement. En effet, si le début de la plasticité est gouverné par du glissement de dislocations (Figure 2.10d), la déformation par maclage (Figures 2.10e et 2.10f) devient dominante à des amplitudes de chargement élevées (à une amplitude de déplacement $> 57 \text{ \AA}$ avec le modèle IFF et à un niveau de déplacement $> 43 \text{ \AA}$ avec le modèle MFF). Ce dernier mode de déformation a été trouvé dans les nanoparticules d'aluminium comprimées dans la même direction par [Salah, 2018].

Avec les modèles MFF et RMF, contrairement à l'IFF, un seul mode de déformation pour chaque modèle a été trouvé dans chaque direction. Néanmoins, dans chaque direction, le comportement obtenu avec le IFF s'approche soit de celui obtenu avec le MFF soit de celui obtenu avec le RMF selon la graine aléatoire. En effet, dans la direction [110], le M1-110 est similaire à celui observé avec le MFF tandis que le M2-110 est plutôt similaire au mode

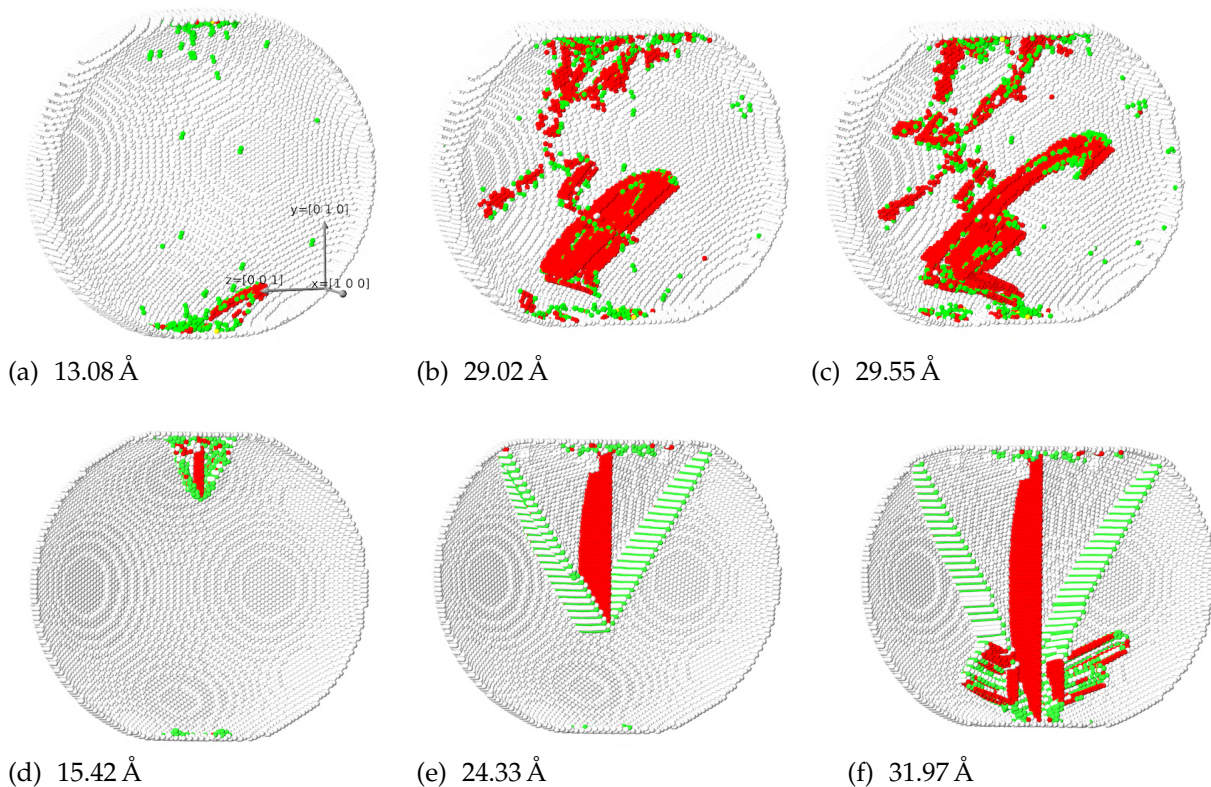


FIGURE 2.9 – Mécanisme de plasticité observé dans la direction $[110]$: (a), (b) et (c) indiquent un mode de déformation dominé par du glissement de dislocations (M1-110). Ce mode de déformation est observé à 10K et 300K avec les champs IFF et MFF uniquement. (d), (e) et (f) indiquent un mode de déformation dominé par du maclage (M2-110). Ce mode de déformation est observé à 10K seulement, avec le IFF et le RMF. À 300K, il est seulement observé avec le RMF (atomes verts : dislocations, atomes blancs : surface, atomes rouges : défauts d'empilement).

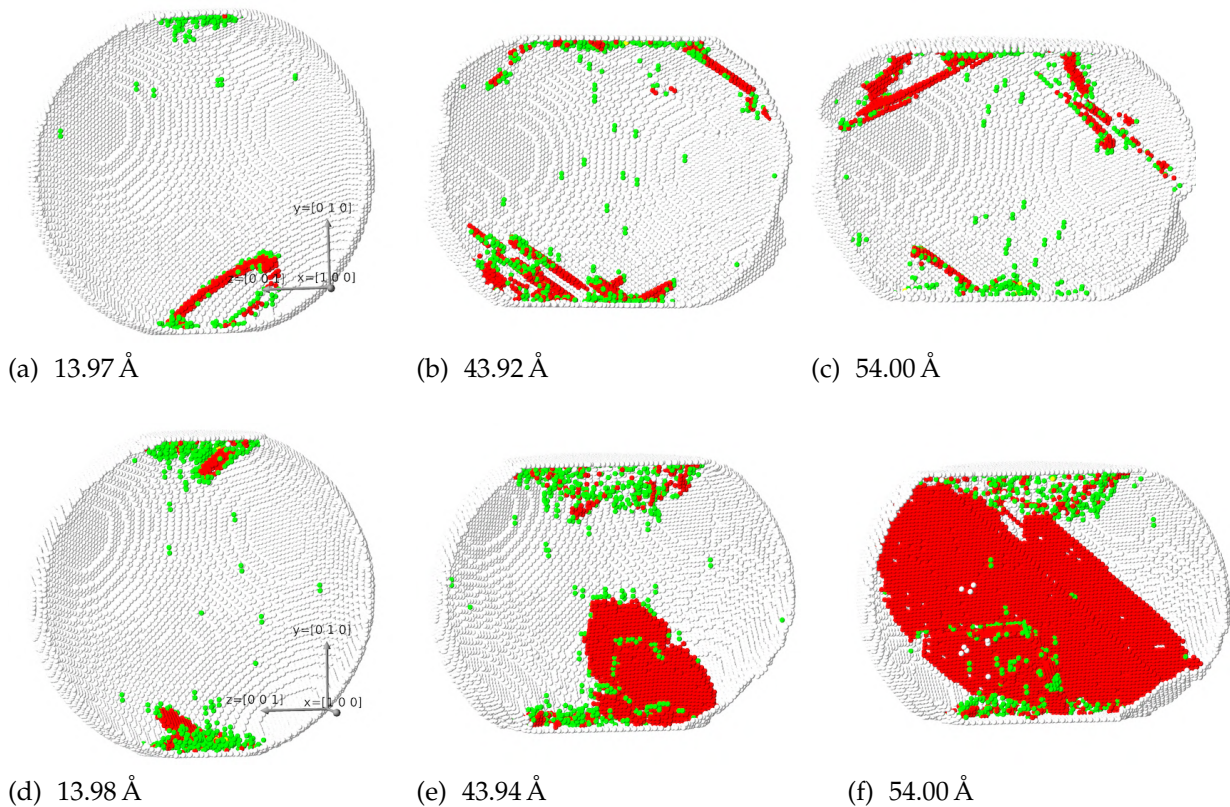


FIGURE 2.10 – Mécanisme de plasticité observé dans la direction $[120]$: (a), (b) et (c) indiquent un mode de déformation dominé par du glissement de dislocations (M1-120). Ce mode de déformation est observé à 10K et 300K seulement avec l'IFF et le RMF. (d), (e) et (f) indiquent un mode de déformation dominé par du glissement de dislocations au début de la plasticité et par du maillage, à un niveau de déplacement de 43 Å et 57 Å respectivement avec les modèles IFF et MFF (M2-120). Ce mode de déformation est observé à 10K et 300K seulement avec le IFF et le MFF (atomes verts : dislocations, atomes blancs : surface, atomes rouges : défauts d'empilement).

de déformation obtenu à avec le modèle *RMF* (Figure 2.8a). Dans la direction [120], on observe la tendance inverse, le *M1-120* est similaire à celui observé avec le *RMF* tandis que le *M2-120* est plutôt similaire au mode de déformation obtenu avec le Modèle *MFF* (Figure 2.8b)).

Présentation des résultats sur l'impact du modèle de champ de force sur l'effet de taille et/ou de géométrie de surface

Afin d'étudier l'influence du modèle de champ de force sur l'effet de taille et/ou de forme, nous nous sommes intéressés aux études réalisées par [Salah et al., 2017]. Dans [Salah et al., 2017], l'*IFF* a été utilisé pour effectuer les tests de compression sur des NPs d'aluminium. La surface de contact a été calculée en utilisant la méthode de Vergeles [Vergeles et al., 1997] avec une distance de contact de 0.1 Å (la distance à partir de laquelle il est considéré que les plaques de compression et la nanoparticule sont en contact). Il a été constaté que la différence en termes de limite d'élasticité entre deux NPs de tailles similaires peut être supérieure à celle entre deux NPs de tailles très différentes. En effet, des limites d'élasticité similaires ont été trouvées avec des NPs de tailles 20.01nm, 8nm et 4.01nm tandis que des limites d'élasticité différentes avec des NP de tailles 20.01nm et 20.17nm ont été observées. Ces résultats s'expliquent par le fait qu'en changeant la taille des NP de 20.01nm à 20.17nm, il se produit une modification de la géométrie de surface (et donc de la surface de contact) qui entraîne une modification de la limite d'élasticité. Dans nos simulations, des résultats similaires représentés sur la Figure 2.11a ont été trouvés en effectuant des tests de compression sur des NPs d'aluminium, en utilisant les mêmes paramètres (même potentiel, même méthode pour calculer la surface, même distance de contact, etc). Cependant, en changeant la distance de contact de 0.1 Å en 1.43 Å qui est le rayon atomique de l'aluminium [Senkov et al., 2014], il se produit un grand changement dans les comportements mécaniques (Figure 2.11b). Les NPs de tailles similaires (20,01nm et 20,17nm) semblent avoir des limites d'élasticité similaires, tandis que celles de tailles différentes (20,01nm et 8nm par exemple) semblent avoir des limites d'élasticité différentes.

En utilisant d'autres modèles de champ de force (*MFF* et *RMF*), des tests de compression ont été effectués avec les mêmes microstructures (NPs de tailles 20.01nm, 20.17nm, 8nm et 4.01nm). La Figure 2.12 montre les courbes de contrainte-déformation obtenues. La distribution observée avec les modèles *MFF* et *RMF* est différente de celle observée avec le modèle *IFF*. Avec le *RMF* (Figure 2.12b), la différence en terme de limite élastique entre les NPs de tailles 20.01nm et 20.17nm diminue par rapport à la différence observée avec le *IFF* (la différence passe de 2GPa à 1,3GPa). Contrairement à la tendance observée avec le

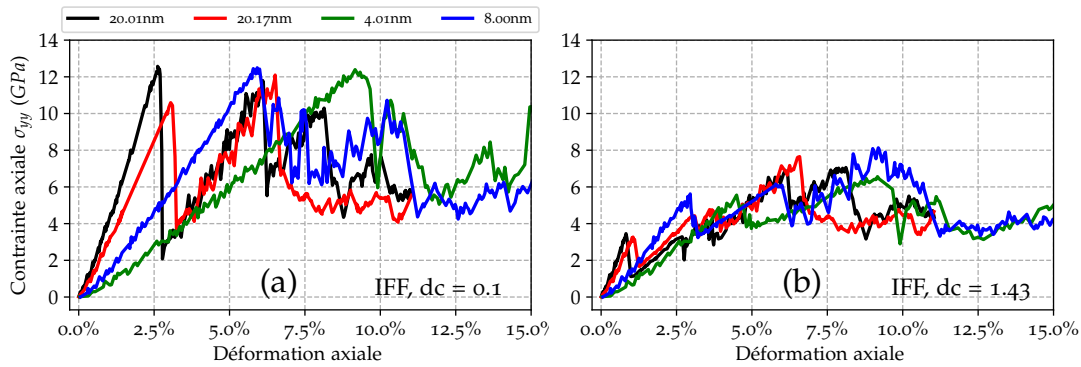


FIGURE 2.11 – Influence de la distance de contact sur l'effet de taille et/ou de forme : (a)-effet de géométrie de surface observé en fixant une distance de contact égale à 0.1 Å, comme observé dans [Salah et al., 2017], (b)-absence d'effet de géométrie de surface quand la distance de contact augmente, passant de 0.1 Å à 1.43 Å.

modèle IFF, la limite élastique du NP de taille 20.17nm devient supérieure à celle de taille 20.01nm. Les NP de différentes tailles ont également des limites d'élasticité différentes. Avec le MFF, la différence en terme de limite élastique entre les NPs de tailles 20.01nm et

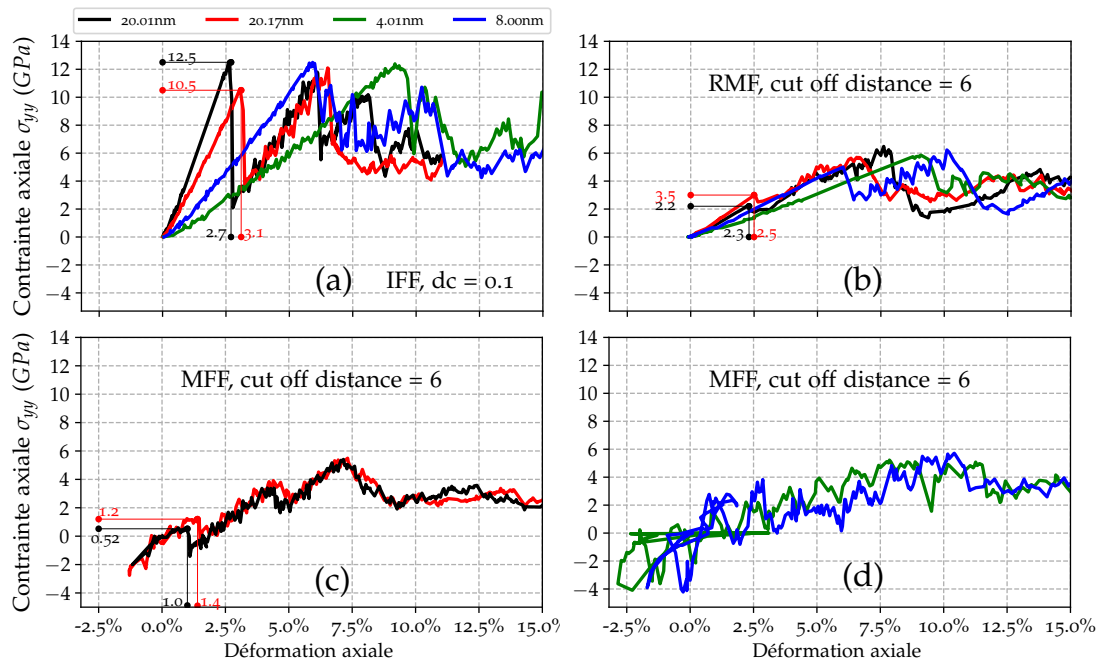


FIGURE 2.12 – Impact du modèle de champ de force sur l'effet de taille et/ou de forme : (a)-effet de géométrie de surface observé en fixant une distance de contact égale à 0.1 Å, comme observé dans [Salah et al., 2017], (b)-absence d'effet de géométrie de surface en effectuant des tests de compression avec le RMF, (c)-limites d'élasticité similaires pour les NPs de taille 20.01nm et 20.17nm lors des tests de compression avec le MFF. La partie attractive du MFF influe de manière significative sur le comportement mécanique des NPs de taille 4.01nm et 8nm, les comportements mécaniques obtenus avec ces deux NPs sont montrés sur la Figure (d).

20.17nm devient égale à 0.68GPa (Figure 2.12c), soit trois fois plus petite que la différence

obtenu avec le modèle *IFF*. Cependant, du fait de l'effet attractif du modèle *MFF*, qui augmente lorsque la taille des NP diminue, il devient très compliqué de faire des comparaisons sur des NP de tailles $4nm$ et $8nm$ (Figure 2.12d). Néanmoins, ce comportement sera discuté dans la section 2.

Discussion de l'influence du modèle de champ de force selon la direction de chargement

Afin de comprendre l'influence des modèles de champ de force sur le comportement mécanique, les effets de chaque modèle lors des essais de compression sur les atomes de la NP ont été considérés. Le modèle *MFF* a un effet à la fois attractif et répulsif. Si à longue distance (si la distance entre la NP et les plaques de compression est supérieure à 2.2 \AA), l'effet attractif domine, à courte distance (la distance entre NP et les plaques de compression est inférieure à 2.2 \AA), l'effet répulsif prend le dessus. Le *RMF*, qui constitue la partie répulsive du *MFF*, ainsi que l'*IFF*, n'ont aucun effet attractif sur les atomes de la NP. Mais, contrairement à l'*IFF*, qui commence à appliquer un effet répulsif sur les atomes de la NP à distance nulle (distance entre les atomes de la NP et les plaques de compression inférieure ou égale à 0.0 \AA), le *RMF* applique un effet répulsif sur les atomes de la NP avant de les atteindre (si la distance entre NP et les plaques de compression est inférieure à 6.0 \AA).

Suivant les directions $[010]$, $[111]$, $[123]$ et $[211]$

Les courbes force-déplacement obtenues en effectuant des essais de compression suivant les directions $[010]$, $[111]$ et $[123]$ à l'aide des trois modèles de champ de force sont présentées sur les Figures 2.4a, 2.4b et 2.4c. L'évolution des mécanismes de plasticité observée dans la direction $[010]$ à l'aide des trois modèles de champ de force est donnée par la Figure 2.5. La même tendance, observée dans la direction $[010]$, est également obtenue dans les directions $[111]$ et $[123]$. Dans ces trois directions, le mécanisme de plasticité est gouverné par le glissement de dislocations pour tous les modèles. En effet, du fait de l'empilement atomique dans cette direction, les dislocations de tête d'empilement sont rapidement rattrapées par les dislocations de queue. Par conséquent, les défauts d'empilement étendus qui favorisent la création de joints de macle, ne peuvent pas se former.

En comparant les résultats obtenus avec les modèles *MFF* et *IFF*, certaines différences sont à souligner. Quelle que soit l'orientation cristallographique, les amplitudes de force correspondant aux points de nucléation sont plus petites avec le modèle *MFF* qu'avec le

modèle *IFF*. De plus, en comparant les mécanismes de plasticité obtenus avec ces deux modèles de champ de force (*MFF* et *IFF*) selon la direction $[010]$, même si le niveau de chargement auquel le mécanisme de plasticité débute est plus faible avec le *MFF* (2.15 Å) qu'avec l'*IFF* (5.41 Å), l'évolution du mécanisme de plasticité observée avec ce dernier est plus rapide que celle obtenue avec le *MFF*. Cependant, en faisant des tests de compression avec uniquement la partie répulsive du *MFF*, c'est-à-dire avec le *RMF*, les amplitudes de force correspondant aux points de nucléation, obtenues dans les directions $[010]$, $[111]$ et $[123]$, deviennent supérieures à celles observées avec l'*IFF*. De plus, l'amplitude de chargement à laquelle débute la plasticité, devient plus grande avec le *RMF* qu'avec l'*IFF* (Figure 2.5). Le retard enregistré dans l'évolution du mécanisme de plasticité avec le *MFF* par rapport l'*IFF*, n'est plus observé avec l'utilisation du *RMF*. Au contraire, l'évolution du mécanisme de plasticité obtenue avec ce dernier est un peu plus en avance, que celle observée avec l'*IFF*. Ces résultats soulignent que les différences observées entre le *MFF* et l'*IFF* sont dues à la partie attractive du *MFF*.

Concernant les nanoparticules de nickel comprimées avec le modèle *MFF*, la formation de trois pyramides a été observée, tandis qu'avec les modèles *IFF* et *RMF*, une seule pyramide se forme. La formation des trois pyramides est attribuée à la partie attractive du *MFF* qui retardent la dissociation et le glissement des dislocations vers le centre de la nanoparticule. Ceci favorise les interactions entre les dislocations, et la formation de nouvelles pyramides.

Dans la direction $[211]$, même si les comportements élastiques obtenus avec les modèles *MFF* et *IFF* sont similaires, une grande différence a été observée avec les comportements plastiques. En effet, le comportement plastique obtenu avec le *MFF* est marqué par un écrouissage accru, lequel n'est pas observé avec l'*IFF*. Ce durcissement plus intense se caractérise par une pente moyenne (ligne bleue sur la Figure 2.4d) cinq fois supérieure à celle obtenue avec le modèle *IFF*. Le mécanisme de plasticité est dominé par du maclage du fait de la géométrie de surface propre à cette direction ([Salah, 2018, Bian et al., 2018b]). Les dislocations de tête générées dans cette direction laissent derrière elles des défauts d'empilement étendus qui favorisent la formation de joints de macle. Ces joints de macle migrent vers le centre de la NP avec l'augmentation de l'amplitude du chargement. Plusieurs études ont montré que le mode de déformation par maclage peut se produire dans l'aluminium [Yamakov et al., 2002, Chen et al., 2003, Frøseth et al., 2004, Wu et al., 2008]. Comparé au mécanisme de plasticité obtenu avec l'*IFF*, avec le *MFF*, une forêt de dislocations se forment derrière les joints de macles lors de leur déplacement vers le centre de la

NP (Figures 2.7d, 2.7e et 2.7f). Le durcissement accru qui est observé avec le *MFF*, est dû à la présence de cette forêt de dislocations. Au début de la plasticité, avec l'*IFF*, on assiste aussi à la formation de dislocations derrière les joints de macles. Cependant, elles glissent facilement vers les faces latérales de la NP où elles s'échappent, laissant derrière elles un réseau parfait (Figures 2.7a, 2.7b et 2.7c).

La différence entre ces deux modèles (*MFF* et *IFF*) dans cette direction s'explique facilement en supprimant la partie attractive du *MFF*, c'est-à-dire en faisant des tests de compression avec le *RMF*, qui est la partie répulsive du *MFF*. La Figure 2.4d montre en noir la courbe obtenue avec le *RMF*. Même si les phases élastiques restent similaires pour tous les modèles, le comportement plastique obtenu avec le *RMF* devient similaire à celui obtenu avec l'*IFF*. Aussi, l'analyse des mécanismes de plasticité montre que la forêt de dislocations observée derrière les joints de macles avec le *MFF* disparaît avec la suppression de la partie attractive de ce dernier (c'est-à-dire en utilisant le *RMF*). Le mécanisme de plasticité, de même que la forme des NPs, observés avec le *RMF* et l'*IFF* deviennent similaires (Figures 2.7g, 2.7h et 2.7i). Le retard enregistré sur le mécanisme de plasticité avec le *MFF*, par rapport à l'*IFF*, disparaît aussi avec l'utilisation du *RMF*. On peut donc conclure, comme dans les directions $[010]$, $[111]$ et $[123]$, que les différences observées entre les deux modèles (*MFF* et *IFF*) dans la direction $[211]$ sont principalement dues à la partie attractive du *MFF*.

Cette conclusion est aussi valable pour les nanoparticules de nickel avec lesquelles la même tendance est observée.

Suivant les directions $[110]$ et $[120]$

Dans ces deux directions (Figure 2.8), les tests de compression réalisés avec l'*IFF* ont montré qu'en relançant trois fois les mêmes calculs avec des graines aléatoires différentes, deux modes de déformation ont été trouvés dans chaque direction. Dans la direction $[110]$, le premier mode de déformation (*M1-110*), nommé *IFF-Model1* sur la Figure 2.8a, est similaire à celui observée avec le *MFF*, mais il est différent du comportement obtenu avec le *RMF*. Cependant, le second mode de déformation (*M2-110*), nommé *IFF-Model2* sur la Figure 2.8a, est plutôt différent de celui observée avec le *MFF* et il est similaire au comportement obtenu avec le *RMF*. Ainsi, avec la suppression de la partie attractive, le comportement mécanique obtenu bascule du mode de déformation *M1-110* au mode de déformation *M2-110*. Le mécanisme de plasticité du premier mode de déformation (*M1-110*) est dominé par le glissement des dislocations, tandis que le second mode de déformation (*M2-110*) est plutôt gouverné par un mode de déformation par maclage (Figure 2.9).

Dans la direction $[120]$, le premier mode de déformation ($M1-120$), représenté sur la Figure 2.8b, est similaire à celui obtenu avec le *RMF*, mais est différent du mode de déformation observé avec le *MFF*, comme la tendance obtenue dans la direction $[211]$ (Figure 2.4d). Par conséquent, cette différence observée entre *l'IFF* et le *MFF* peut être liée à la partie attractive de ce dernier. À noter que l'amplitude de chargement obtenue avec le *RMF* dans la phase plastique est supérieure à celle observée avec *l'IFF*. Cette différence pourrait être liée au fait que dans cette direction, les dislocations de type sessiles formées avec le *RMF* sont plus importantes que celles observées avec *l'IFF*. Le second mode de déformation ($M2-120$), comme la tendance observée dans les directions $[010]$, $[111]$ et $[123]$ (Figures 2.4a, 2.4b et 2.4c) est similaire à celui observé avec le *MFF*. Contrairement à *l'IFF*, avec le *MFF* et le *RMF*, un seul mode de déformation a été trouvé dans les directions $[110]$ et $[120]$. En effet, avec *l'IFF*, seuls les atomes qui sont atteints ou dépassés par les plaques de compression subissent l'effet du champ de force. Avec les modèles *MFF* et *RMF*, tous les atomes qui sont à une distance inférieure à 6.00 Å subissent l'effet. Ainsi, davantage de couches atomiques sont atteintes lors des tests de compression avec les modèles *MFF* et *RMF*. Un début de mécanisme de plasticité contrôlé par plusieurs couches atomiques (*MFF* et *RMF*) est plus stable que celui qui dépend fortement de la première couche atomique (*IFF*).

Afin de trouver le mode de déformation qui se produit le plus fréquemment avec *l'IFF* dans les directions $[110]$ et $[120]$, dix autres calculs avec différentes graines aléatoires ont été effectués suivant chaque orientation ($[110]$ et $[120]$), à 10K et 300K. Dans la direction $[110]$, à 10K, les résultats montrent que le pourcentage d'apparition du mode $M1-110$ est de 70% (7 calculs sur 10 lancés donnent le mode $M1-110$) contre 30% pour le mode $M2-110$ (3 calculs sur 10 lancés donnent le mode $M2-110$). En revanche, à 300K, seul le mode $M1-110$ a été observé. Ainsi, avec *l'IFF*, le mode $M2-110$ qui est observé à 10K, pourrait être lié à une configuration particulière qui ne se produit qu'à basse température. Ces résultats montrent que, pour obtenir des résultats représentatifs, les simulations en dynamique moléculaire réalisées à basse température, doivent être vérifiées à température ambiante avec plusieurs graines aléatoires, afin d'éviter de tomber sur des configurations particulières. Dans la direction $[120]$, à 10K, 40% du mode $M1-120$ a été observé, contre 60% pour le mode $M2-120$. Ces deux modes de déformation sont aussi observés à 300K dans des proportions proches de celles obtenues à 10K. L'apparition de ces deux modes de déformation peut être due au fait que *l'IFF* est moins stable dans certaines directions car il ne présente aucun effet (attractif ou répulsif) avant contact, ni à longue ni à courte distance, contrairement aux modèles *MFF* et *RMF*.

Discussion de l'influence du modèle de champ de force sur l'effet de taille et/ou de forme

La Figure 2.11a montre que des nanoparticules de tailles similaires pourraient avoir des limites d'élasticité différentes, tandis que celles de tailles différentes pourraient avoir des limites d'élasticité similaires. Ce comportement a été lié à un effet de géométrie de surface [Salah et al., 2017]. Nos simulations montrent qu'en changeant la distance de contact, on observe une autre tendance, différente de celle liée à un effet de géométrie de surface (Figure 2.11b). Pour comprendre le changement qui se produit dans le comportement mécanique, les variations des surfaces de contact lors des essais de compression ont été considérées en changeant la distance de contact. Les Figures 2.13a et 2.13b présentent les évolutions des surfaces de contact en fonction de la valeur de la distance de contact (0.1 Å et 1.43 Å).

Rigoureusement, la distance de contact de l'IFF est égale à zéro, car ce dernier n'appli-

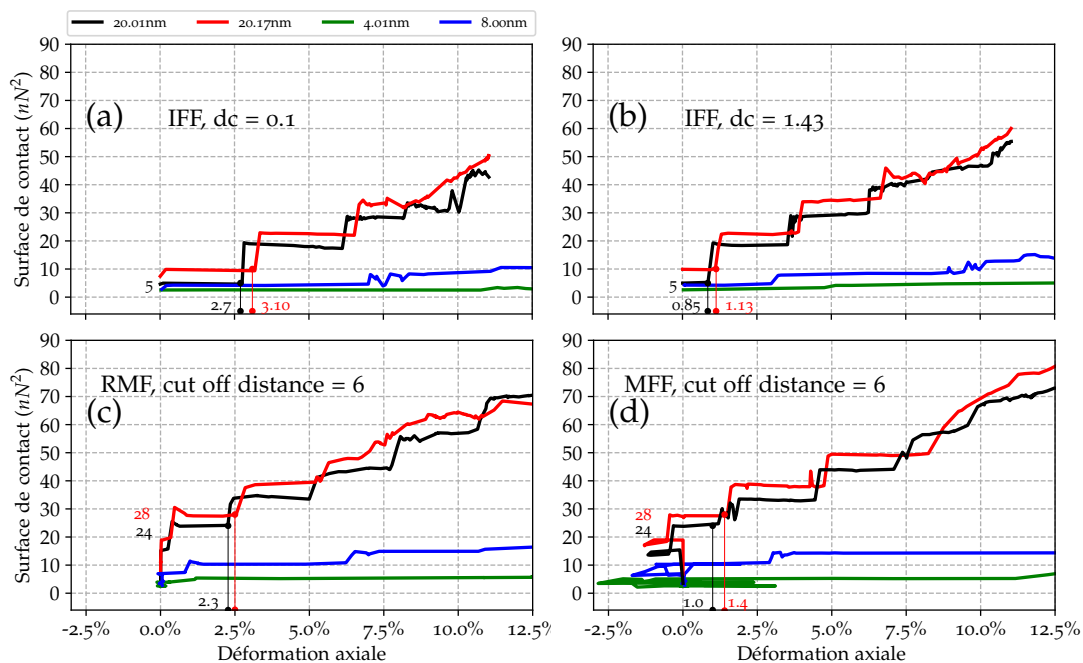


FIGURE 2.13 – Impact du modèle de champ de force sur l'effet de taille et/ou de forme : (a) et (b)-variations des surfaces de contact pour l'IFF avec des distances de contact de 0.1 Å et 1.43 Å respectivement, (c) and (d)-variations des surfaces de contact pour les modèles RMF et MFF respectivement avec une distance de coupure de 6.0 Å.

quera une force que sur les atomes de la NP qui sont atteints ou dépassés. Mais, souvent, des valeurs arbitraires positives sont utilisées pour définir la distance de contact. La valeur de la distance de contact a été fixée égale à 0.1 Å et 1.43 Å par [Salah et al., 2017] et [Kilymis et al., 2018], respectivement. Nos simulations montrent sans ambiguïté que cette distance

de contact a un effet sur la variation de l'aire de contact et par conséquent, un effet sur les courbes contrainte-déformation. Plus précisément, en augmentant la distance de contact de 0.1 Å à 1.43 Å, les amplitudes de déformation auxquelles les premières augmentations des aires de contact sont observées diminuent. Par conséquent, les amplitudes de déformation et de contrainte auxquelles les premières chutes sont observées diminuent de concert (Figure 2.11).

En faisant des tests de compression avec les modèles *RMF* et *MFF*, un grand changement a également été observé dans les comportements mécaniques. Les limites d'élasticité des NPs diminuent et la différence en termes de limite d'élasticité entre des nano-sphères de tailles similaires (20,01nm et 20,17nm) diminue. Les limites d'élasticité des NPs de tailles différentes sont également différentes (Figure 2.12). Ainsi, les comportements observés avec les modèles *RMF* et *MFF* ne peuvent pas être liés à un effet de géométrie de surface, contrairement à ceux obtenus avec l'*IFF*. Pour comprendre les comportements obtenus avec les modèles *RMF* et *MFF* par rapport à ceux observés avec le modèle *IFF*, les variations des aires de contact et des forces de chargement lors des essais de compression ont aussi été considérées. En comparant les évolutions des forces de chargement obtenues avec le modèle *IFF* (Figure 2.14a) à celles observées avec le modèle *RMF* (Figure 2.14b), des comportements similaires ont été observés même si, les amplitudes de chargement auxquelles les premières chutes sont observées, sont plus importantes avec le modèle *RMF* qu'avec le modèle *IFF*. Cependant, des surfaces de contact moins importantes ont été obtenues avec l'*IFF*, comparé au modèle *RMF*. Cette différence peut être liée au fait que le *RMF* présente une interaction à distance. Ainsi, les limites d'élasticité obtenues avec ce dernier sont plus faibles que celles observées avec l'*IFF* (Figure 2.11). Contrairement à ce dernier, avec le *RMF*, la limite d'élasticité enregistrée avec la NP de taille 20.17nm est un peu supérieure à celle obtenue avec la NP de 20.01nm de taille (Figure 2.12b). Quand les premiers événements plastiques sont pilotés par un faible nombre de couches atomiques, constituant la surface de contact de la NP (comme dans le cas de l'*IFF*), l'effet de la géométrie de surface de la NP domine l'effet de la force (Figure 2.13a), et une petite variation de surface entraînera un grand changement de comportement mécanique. Comme les NP de taille 20.17nm ont des surfaces de contact supérieures à celles de taille 20.01nm, les limites d'élasticité de ces dernières seront plus élevées que celles de taille 20.17nm. En revanche, avec des surfaces plus grandes, comme celles obtenues avec le *RMF*, une petite variation des aires de contact conduira à un changement du comportement mécanique moins important que celui obtenu avec l'*IFF* (Figure 2.13c), et l'effet de force dominera sur l'effet de géométrie de surface. Ainsi, avec le *RMF*, la limite d'élasticité obtenu avec la NP de taille

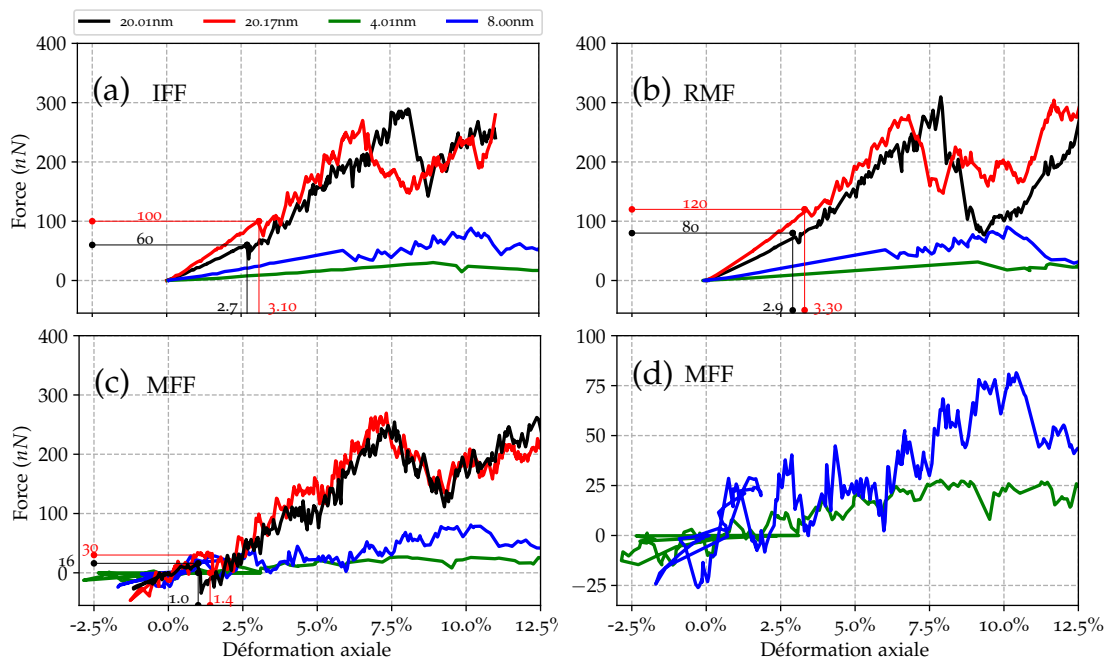


FIGURE 2.14 – Impact du modèle de champ de force sur le comportement mécanique : (a) et (b) – l'évolution des forces de chargement pour les modèles IFF et RMF respectivement, (c) – variations des forces de chargement avec le modèle MFF pour les NPs de tailles 20.17nm et 20.01nm (la partie attractive du MFF influe de manière significative sur le comportement mécanique avec la diminution de la taille des NPs, les comportements mécaniques observés avec les NPs de tailles 8nm et 4nm sont montrés dans la Figure (d) pour une meilleure visibilité).

20.17nm reste supérieure à celle obtenue avec la NP de 20.01nm de taille. Avec le MFF (Figure 2.13d), des comportements similaires à ceux observés avec le RMF ont été observés sur des NPs de tailles 20.17nm et 20.01nm, à ceci près que, des comportements plus proches ont été observés entre ces deux NPs, du fait de la partie attractive du MFF (Figure 2.12c). Avec des NPs de tailles 8nm et 4nm, l'effet attractif du MFF a un impact important sur leur comportement mécanique. En effet, si la taille des NP diminue, le nombre d'atomes de surface augmentera tandis que la proportion d'atomes dans le volume diminuera. Comme les atomes de surface sont plus mobiles que les atomes qui sont dans le volume, cela augmentera la sensibilité du comportement mécanique vis-à-vis de l'effet attractif du MFF. Avec des NP de tailles 8nm et 4nm, la proportion d'atomes de surface devient si importante que les comportements obtenus deviennent difficilement analysables du fait de l'effet attractif du MFF (Figure 2.14).

Afin d'évaluer l'impact de la définition de la surface de contact sur le comportement mécanique, deux méthodes ont été utilisées pour calculer les aires de contact lors des essais de compression. La première méthode est celle développée par Vergeles [Vergeles et al., 1997] utilisée dans [Salah et al., 2017], elle sera nommée Vergeles. La seconde méthode

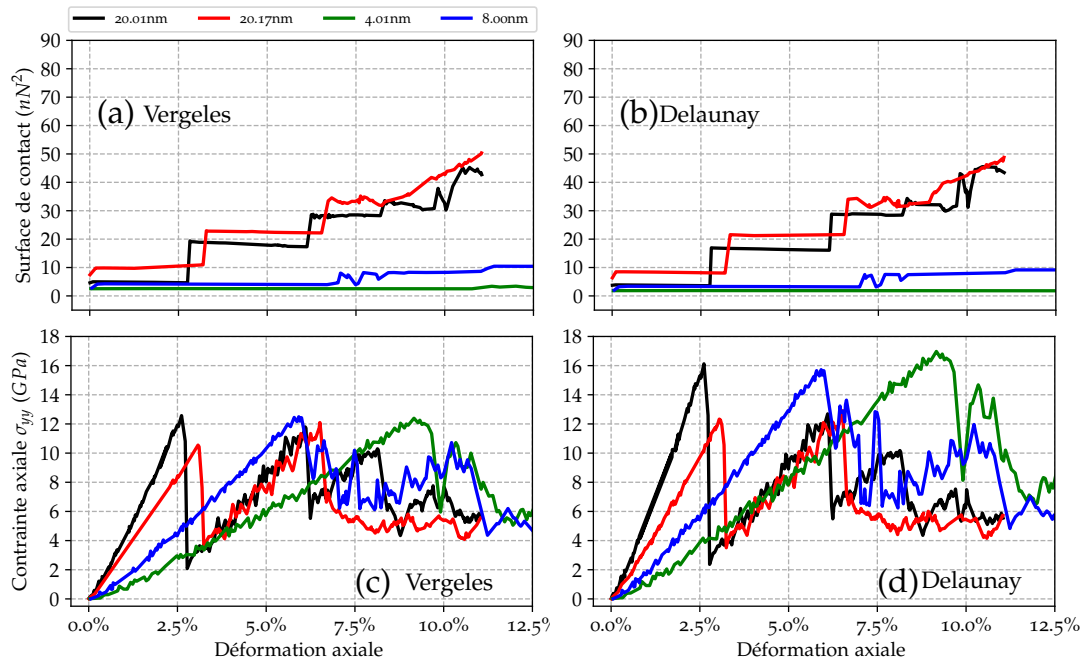


FIGURE 2.15 – Influence de la définition de la surface de contact sur le comportement mécanique obtenu avec l'IFF : (a) et (b)-l'évolution des surfaces de contact avec une distance de contact de 0.1 en utilisant les méthodes de Vergeles et Delaunay respectivement, (c) and (d)-courbes contrainte-déformation obtenues avec ces deux méthodes (Vergeles et Delaunay respectivement).

qui est basée sur la triangulation de Delaunay, a été utilisée par [Kilymis et al., 2018], elle sera nommée Delaunay. Pour ces deux modèles, avec l'IFF, la même distance de contact de 0.1 Å est fixée pour les deux méthodes afin de calculer les surfaces de contact. La Figure 2.15 montre les variations des aires de contact et des contraintes obtenues en utilisant la méthode de Vergeles (Figures 2.15a et 2.15c) et celle de Delaunay (Figures 2.15b et 2.15d). Même si, avec l'IFF, de petites variations ont été observées en comparant l'évolution des surfaces de contact obtenues avec les deux méthodes, les limites d'élasticité observées avec la méthode Delaunay sont supérieures à celles observées avec celle de Vergeles. Cette variation observée sur les limites d'élasticité (avec des NP de tailles 20.01nm, 8nm et 4nm) en changeant la méthode d'évaluation des aires de contact est au moins deux fois supérieure à la différence observée entre les limites d'élasticité obtenues avec les NPs de tailles 20.17nm et 20.01nm en utilisant la méthode de Vergeles. Cependant, en termes d'effet de géométrie de surface, des tendances similaires sont observées avec les deux méthodes (Delaunay et Vergeles). Avec le modèle RMF (Figure 2.16), en changeant la méthode de calcul des aires de contact, les variations de surfaces observées sont supérieures à celles enregistrées avec le modèle IFF. Cependant, l'impact de ces variations sur les limites d'élasticité est inférieur à celui observé avec l'IFF. En utilisant le MFF (Figure 2.17), des variations de surfaces similaires à celles obtenues avec le RMF ont été observées avec la modification de

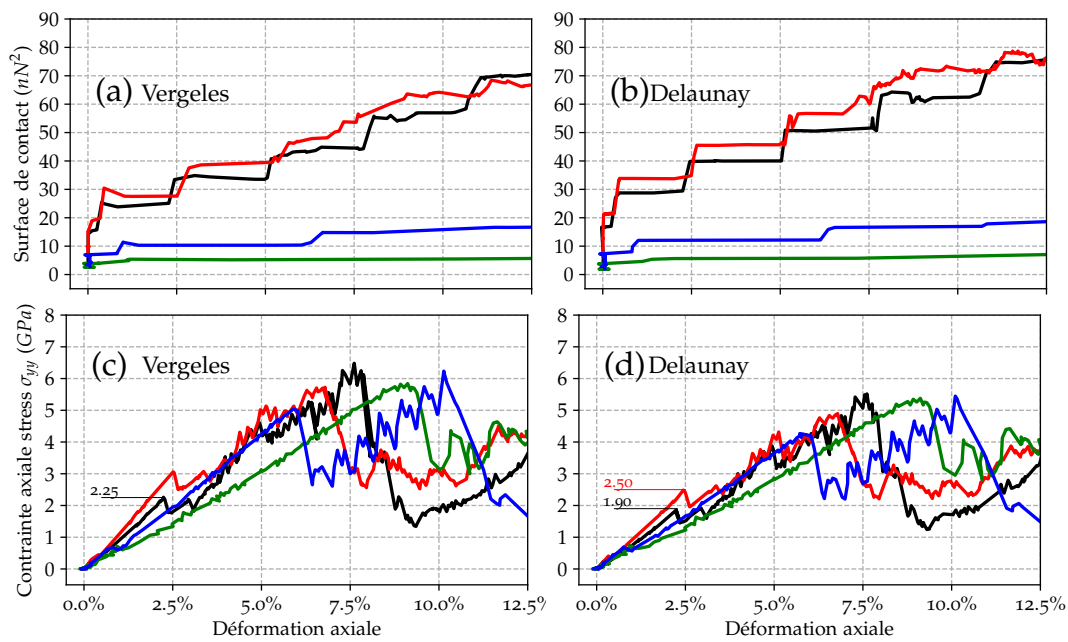


FIGURE 2.16 – Impact de la définition de la surface de contact sur le comportement mécanique obtenu avec le RMF : (a) et (b)-l'évolution des surfaces de contact avec un rayon de coupure de 6.0 en utilisant les méthodes de Vergeles et Delaunay respectivement, (c) et (d)-courbes contrainte-déformation obtenues avec ces deux méthodes (Vergeles et Delaunay respectivement).

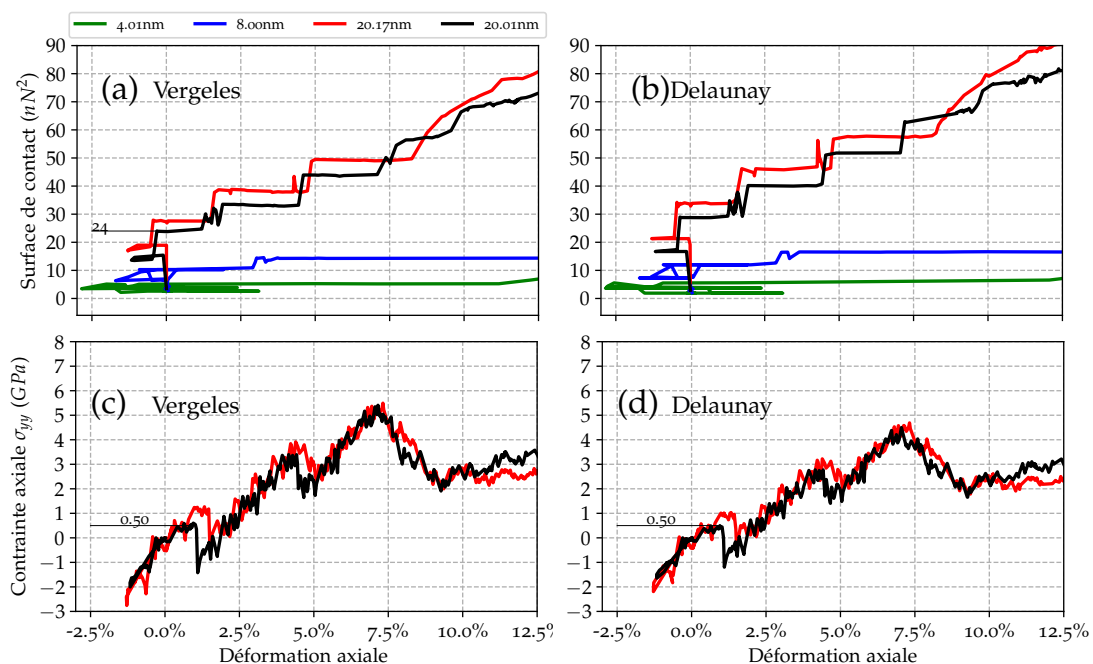


FIGURE 2.17 – Impact de la définition de la surface de contact sur le comportement mécanique obtenu avec le MMF : (a) et (b)-l'évolution des surfaces de contact avec un rayon de coupure de 6.0 en utilisant les méthodes de Vergeles et Delaunay respectivement, (c) et (d)-courbes contrainte-déformation obtenues avec ces deux méthodes (Vergeles et Delaunay respectivement). Pour une meilleure visibilité, les NPs de 8nm et de 4nm de taille ne sont pas montrées ici.

la méthode de calcul des aires de contact. Cependant, en comparant les limites d'élasticité obtenues avec les deux méthodes (Vergeles et Delaunay), aucune variation notable n'a été observée. Ainsi, le *RMF* et le *MFF* semblent plus stables en regard de la définition de l'aire de contact que l'*IFF*.

En effet, l'*IFF* crée une situation de choc qui n'est pas forcément pertinente au regard du chargement étudié. La distance de contact ainsi que la méthode d'évaluation de la surface de contact ont une grande incidence sur le comportement mécanique obtenu avec l'*IFF*. Ces deux problèmes peuvent être résolus en utilisant le modèle *RMF*. Cependant, avec des NP de petite taille (comme les NP de taille $8nm$ et $4.01nm$), les comportements observés avec le *MFF* montrent que l'*IFF* et le *RMF* ne peuvent pas être représentatifs à ce niveau en raison de l'importance de l'effet attractif du *MFF* sur le comportement mécanique. Avec des nanoparticules de tailles plus grandes, l'effet attractif devient moins important, et l'utilisation du modèle *RMF* devient pertinente.

CONCLUSION DU CHAPITRE

Par rapport à la littérature

Dans ce chapitre, nous avons présenté les différentes étapes de la dynamique moléculaire classique tout en soulignant les avantages et inconvénients liés aux potentiels semi-empiriques qui sont utilisés avec cette méthode classique par rapport à la méthode *ab – initio* qui est basée sur la résolution de l'équation de Schrödinger. La méthode classique permet d'effectuer des calculs sur des tailles plus grandes comparée à la méthode *ab – initio* mais donne des résultats moins précis que ce dernier.

Des investigations ont été menées pour répondre à certaines questions comme :

- quel est l'effet de la représentation du champ de force sur les mécanismes se développant dans des nanoparticules ?
- Quel influence a le calcul de l'évolution de la surface de contact sur les caractéristiques mécaniques ?
- Quel rôle joue la taille de la particule en lien avec la définition du champ de force ?
- Quel modèle de champ de force est le mieux adapté pour simuler la compression des nanoparticules ?

Ce qui est nouveau

À l'aide de trois modèles de champ de force, des tests de compression ont été effectués sur des nanoparticules d'aluminium de différentes tailles selon six orientations cristallographiques, et de nickel de 20nm de taille dans les directions [010] et [211].

Avec les nanoparticules d'aluminium, selon les directions [010], [111] et [123], les comportements mécaniques observés avec les trois modèles de champ de force sont similaires. Cependant, suivant la direction [211], un durcissement plus prononcé a été observé avec le modèle *MFF*, par rapport au modèle *IFF*. Ce durcissement accru a été lié à la présence de dislocations piégées par la partie attractive du modèle *MFF*, puisque le comportement mécanique obtenu avec le modèle *RMF* qui représente la partie répulsive du *MFF* est similaire à celui obtenu avec le *IFF*.

Dans les directions [010] et [211], les mêmes tendances observées avec les nanoparticules d'aluminium sont aussi observées avec celles de nickel, à la différence qu'avec ces dernières, dans la direction [010], si une seule pyramide se forme avec les modèles *IFF* et *RMF*, avec le modèle *MFF*, trois pyramides sont formées.

Dans les directions [110] et [120], en faisant des tests de compression avec l'*IFF* à 10K,

deux modes de déformation ont été trouvés dans chaque direction. A 300K, dans la direction [110], seul le premier mode de déformation ($M1-110$) a été observé. Cependant, dans la direction [120], les deux modes de déformation sont toujours observés. Contrairement au modèle *IFF*, avec les modèles *RMF* et *MFF*, à 10K et 300K, un seul mode de déformation a été trouvé quelle que soit la direction de chargement. En raison de leur possibilité à interagir à longue et courte portée, les modèles *RMF* et *MFF* appliquent des chargements progressifs lors de la compression contrairement au modèle *IFF*, qui a un effet plus brutal. Ainsi, les comportements obtenus avec les modèles *RMF* et *MFF* sont plus stables en regard de la définition de la surface de contact que ceux observés avec le modèle *IFF*.

En faisant des tests de compression sur des nanoparticules d'aluminium de différentes tailles selon la direction [010], l'effet de géométrie de surface observé avec le modèle *IFF* n'a pas été obtenu avec les modèles *RMF* et *MFF*. En effet, avec le modèle *IFF*, du fait de son effet de seuil, le comportement mécanique est gouverné par un effet de géométrie de surface. Cependant, avec les modèles *RMF* et *MFF*, leurs effets progressifs font que le comportement est plutôt dominé par l'effet de la force.

Le modèle *IFF* est plus sensible aux variations de surface que les modèles *RMF* et *MFF*. En changeant la méthode utilisée pour évaluer la surface de contact pendant la compression, un impact plus important sur la variation des limites d'élasticité a été observé avec le modèle *IFF* par rapport aux modèles *RMF* et *MFF*.

Ce qu'il faut retenir

Les grandes lignes à souligner dans cette partie sont :

- le modèle de champ de force peut avoir un impact significatif sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées selon l'orientation cristallographique ;
- des comportements et des modes de déformation plus stables, c'est-à-dire des comportements qui restent similaires quel que soit le *random seed* et quelle que soit la température fixée entre 10K et 300K, sont obtenus avec les modèles *MFF* et *RMF*, contrairement au modèle *IFF* ;
- si l'effet de la géométrie de surface domine avec l'*IFF*, avec les modèles *MFF* et *RMF*, l'effet de la force devient plus important ;
- dans les directions où des comportements similaires sont observés, plus la taille de la nanoparticule est petite, plus l'effet attractif du *MFF* est significatif. De ce fait, moins l'utilisation des modèles *IFF* et *RMF* est pertinente. En revanche, plus la taille de la nanoparticule est grande, plus l'effet attractif du *MFF* est faible. Par conséquent, plus les comportements obtenus pour les différents modèles se rapprochent ;

- avec les modèles *MFF* et *RMF*, les tendances observées avec les NPs d'aluminium sont similaires à celles constatées avec les NPs de nickel. Cependant, avec le modèle *IFF*, dans la direction $[010]$, des différences sont observées sur le nombre de pyramides formés au début de la plasticité en fonction du matériau.

COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES NANOPARTICULES DE Ni_3Al

SOMMAIRE

INTRODUCTION	103
STRUCTURE CRISTALLOGRAPHIQUE	104
MÉCANISME DE PLASTICITÉ DU PRÉCIPITÉ Ni_3Al	104
COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES NANOPARTICULES DE Ni_3Al À TEMPÉRATURE AM- BIANTE	108
Comportement des nano-cubes et nano-cubes arrondis de Ni_3Al	109
Influence de l'orientation de l'axe de sollicitation	117
Comportement mécanique des nano-sphères de Ni_3Al	122
DESCRIPTION DU COMPORTEMENT MÉCANIQUE À HAUTE TEMPÉRATURE	129
Cubes : comportement mécanique et mécanisme de plasticité	131
Cubes arrondis : comportement mécanique et mécanisme de plasticité	134
Sphère : comportement mécanique et mécanisme de plasticité	137
CONCLUSION	141
Par rapport à la littérature	141
Ce qui est nouveau	141
Ce qu'il faut retenir	142

=====

INTRODUCTION

DANS les parties du moteur (disques et aubes de turbine) où le matériau est soumis à des sollicitations mécaniques à haute température, il s'avère que la tenue en mécanique dans les superalliages base nickel est assurée en grande partie grâce aux précipités $Ni_3(Al, Ti \dots)$ [Reed, 2008, Thornton, 1970, Pope and Ezz, 1984]. Ceci est une des raisons pour laquelle plusieurs études ont été effectuées sur l'intermétallique $Ni_3(Al, Ti \dots)$ dans le but de comprendre son comportement mécanique afin de pouvoir expliquer son influence dans les modes de déformation observés [Benyoucef et al., 1995, Srinivasan et al., 2000]. De nombreuses études ont montré que la forme, la taille, de même que la fraction volumique de ces précipités ont des influences non négligeables sur le comportement mécanique des superalliages base nickel [Prakash et al., 2015, Harte et al., 2020]. Cependant, si plusieurs investigations ont été conduites à l'échelle macroscopique sur ces précipités, les études conduites sur des précipités nanométriques isolés de Ni_3Al sont essentiellement de nature numérique et obtenues grâce à la technique de la dynamique moléculaire [Xie et al., 2012, Shreiber and Mordehai, 2015, Amodeo and Lizoul, 2017]. Les quelques données expérimentales disponibles se situent à l'échelle du micron avec des tailles comprises entre $250nm$ à $850\mu m$ [Schloesser et al., 2011, Maaß et al., 2012]. Cette absence de données expérimentales sur des précipités isolés de taille nanométrique est imputable à la difficulté liée à leur extraction [Gerberich et al., 2003]. Toutefois, les études disponibles ont permis aujourd'hui d'avoir une meilleure compréhension du comportement mécanique de ces nano-précipités comparés à ceux de taille macroscopique. Mais le fait que ces études soient souvent effectuées à des températures faibles limite notre champ de compréhension sur ces nanomatériaux.

L'objectif de ce chapitre est de proposer une description du comportement mécanique des nanoparticules de Ni_3Al isolées dans des conditions de sollicitations proches de leur conditions de vie dans les moteurs. Différentes températures sont considérées pour analyser les mécanismes de base.

Après un bref rappel de la structure cristallographique ainsi que des mécanismes de plasticité habituellement observés dans ces types de précipités, nous allons nous intéresser à la description de leur comportement mécanique en température tout en prenant en compte les questions de taille, de forme et d'orientation cristallographique.

STRUCTURE CRISTALLOGRAPHIQUE

L'intermétallique Ni_3Al a une structure de type $L1_2$ similaire à celle d'une structure cubique à faces centrées (CFC), à la différence près que la structure $L1_2$ comporte deux sous-systèmes (réf. Figure 1.21 du chapitre 1) formés comme suit :

- des atomes de Ni occupent les centres des faces,
- des atomes d' Al ou de ($Ti \dots$) occupent les sommets du cube.

De ce fait, avec le réseau $L1_2$, sous l'effet d'un chargement mécanique, la rupture et la formation de nouvelles liaisons liées à la formation de certains défauts tels que les dislocations peuvent conduire à des configurations et de mécanismes de plasticité très différents de ceux observés habituellement dans la structure CFC classique.

MÉCANISME DE PLASTICITÉ DU PRÉCIPITÉ Ni_3Al

L'intermétallique Ni_3Al présente des mécanismes de plasticité très riches, mais aussi très complexes, du fait l'organisation de sa microstructure.

La plasticité du Ni_3Al est principalement gouvernée par le glissement des dislocations de vecteur de Burgers $\langle 110 \rangle$ qui peuvent se dissocier de différentes manières selon les conditions et la nature de la sollicitation. La Figure 3.1 illustre un certain nombre de défauts susceptibles de se former dans la structure $L1_2$ selon la direction de cisaillement. La configuration 3.1(a) correspond à un empilement de trois plans $\{111\}$ sans défaut, les petits, moyens et grands cercles représentant respectivement les couches du bas, du milieu et du haut. Les cercles foncés représentent des atomes de nickel et les cercles clairs représentent des atomes d'aluminium. Un cisaillement dans la direction $1/2[\bar{1}01]$ (Figure 3.1b) par exemple, entrainera la formation des liaisons de type $Al-Al$ correspondant à une paroi d'antiphase (APB, pour *antiphase boundary*) qui va perturber l'ordre de liaison des plus proches voisins. Si le cisaillement se produit avec un déplacement de la couche du haut par le biais d'un vecteur de type $1/3[\bar{2}11]$ (Figure 3.1c), on verra alors une superposition des atomes d' Al du plan qui est en haut avec ceux des atomes du bas plan. Ceci se traduit par la formation d'un défaut dans la séquence d'empilement appelé défaut d'empilement intrinsèque du super-réseau (SISF, pour *superlattice intrinsic stacking fault*) qui va changer d'un empilement de type $\dots ABCABCABCABC \dots$ en un empilement de type $\dots ABCA|CABCABC \dots$ (la barre verticale représentant l'endroit où le défaut d'empilement s'est créé) sans violation des liaisons des plus proches voisins. Tous se passe comme si on avait enlevé une couche B dans la séquence $\dots ABC \dots$. Si maintenant le cisaillement se produit avec un vecteur de type $1/6[\bar{1}\bar{1}2]$, on obtiendra un défaut d'empilement complexe

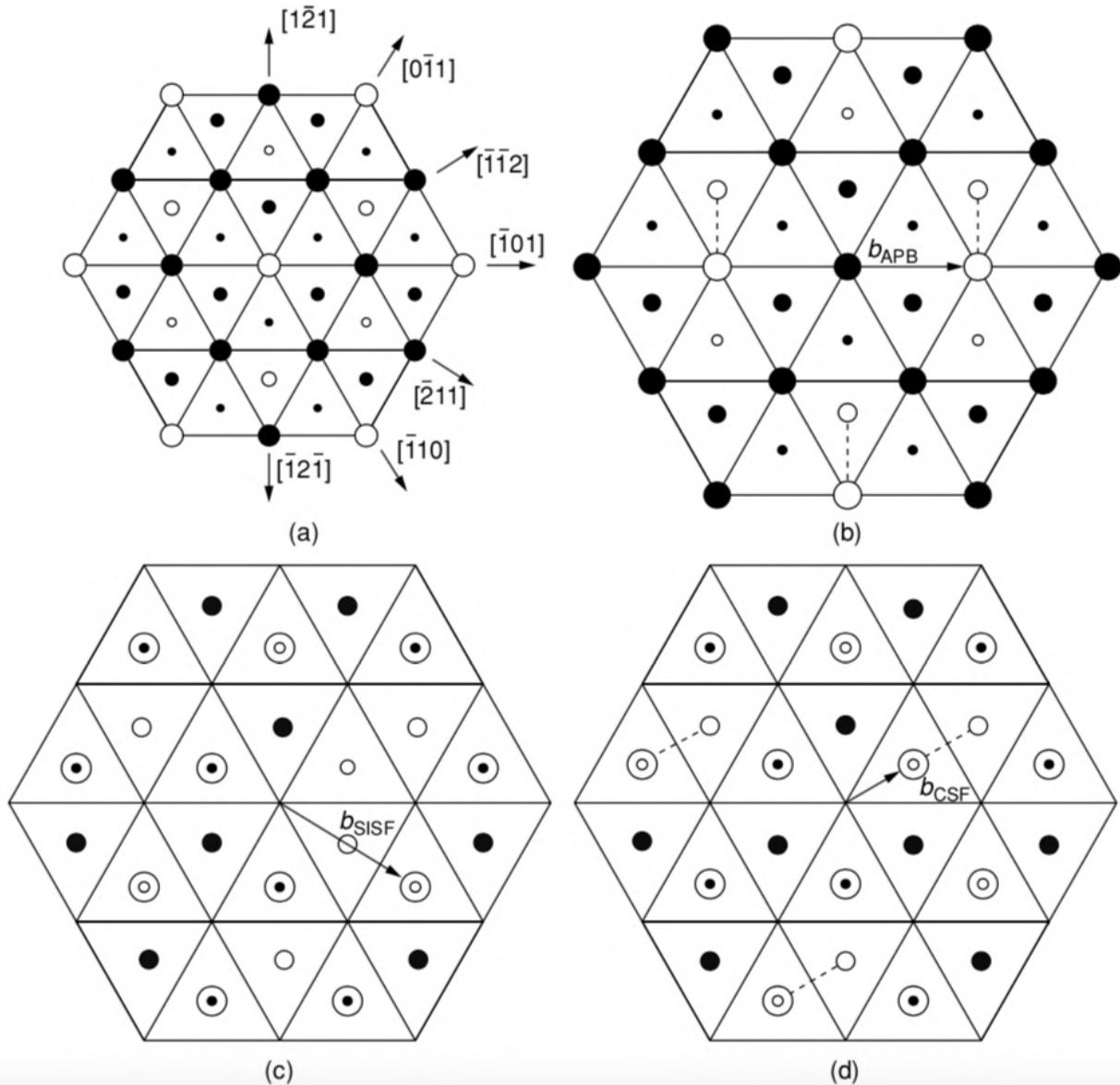


FIGURE 3.1 – Les petits, moyens et grands cercles représentent respectivement les couches du bas, du milieu et du haut. Les cercles foncés représentent des atomes de nickel et les cercles clairs représentent des atomes d'aluminium. (a)-Empilement de trois plans $\{111\}$ avant cisaillement (sans défaut), (b)-cisaillement dans la direction $1/2[\bar{1}01]$ et formation d'un paroi d'antiphase (APB), (c)-cisaillement dans la direction $1/3[\bar{2}11]$ et formation d'un défaut d'empilement intrinsèque (SISF), (d)-cisaillement dans la direction $1/6[\bar{1}12]$ et formation d'un défaut d'empilement complexe (CSF) [Pope and Ezz, 1984].

(CSF, pour *complex stacking fault*), similaire aux défauts d'empilement observés dans les matériaux ayant des structures CFC (Al , Ni , Cu ...), se traduisant sur la Figure 3.1d par une superposition directe des atomes d' Al du plan haut avec les atomes Ni du plan bas. Ceci va créer à la fois un changement dans la séquence d'empilement et dans l'ordre des liaisons des plus proches voisins. C'est la raison pour laquelle l'énergie d'un CSF est souvent plus importante que celle d'un APB qui est elle-même plus importante que celle d'un SISF.

A faible température ($T < 300K$ par exemple), les systèmes de glissement qui s'activent de manière préférentielle pendant la plasticité sont ceux de type $\langle 110 \rangle \{111\}$ similaires à ceux qui sont observés sur les matériaux de structures CFC. Cependant dans le cas du précipité Ni_3Al , la dissociation de la super-dislocation $\langle 110 \rangle$ peut donner naissance à plusieurs configurations qui ne sont pas observées dans les matériaux de structure CFC. Le mouvement des dislocations se fait souvent par paires de dislocations de vecteurs de Burgers $1/2 \langle 110 \rangle$ dans le précipité pour des raisons de stabilité énergétique. Le glissement d'une dislocation individuelle de type $1/2 \langle 110 \rangle$ entrainerait la création d'une paroi d'antiphase (APB) qui nécessiterait une quantité d'énergie non négligeable, alors que celui d'une dislocation de type $\langle 110 \rangle$ demanderait une quantité d'énergie moins importante et pourrait donc glisser avec plus d'aisance [Reed, 2008]. Partant du fait que l'énergie de dislocation est proportionnelle au carré du module du vecteur de Burgers, on peut comprendre que si le glissement par paires de dislocations est plutôt favorisé, c'est parce que l'énergie des dislocations diminue avec la dissociation du super-dislocation $\langle 110 \rangle$ en deux super-partielles de type $1/2 \langle 110 \rangle$ (équation 3.1) :

$$[\bar{1}01] \Rightarrow 1/2[\bar{1}01] + 1/2[\bar{1}01]. \quad (3.1)$$

La paroi d'antiphase créée par la première dislocation est ainsi supprimée par la seconde. De ce fait, les deux dislocations super-partielles glissent dans le précipité tout en étant séparées par une paroi d'antiphase (Figure 3.2a) et en laissant derrière elles un réseau parfait. Il faut noter cependant que, même si les APBs se forment souvent dans les plans $\{111\}$ à faible température, il n'en va pas forcément de même à hautes températures. En effet, à hautes températures ($T > 800K$ par exemple), et avec des vitesses de déformation supérieures à $10^{-5}s^{-1}$ [Reed, 2008], on peut avoir un glissement dévié (Figure 3.2b) de la dislocation de type $1/2 \langle 110 \rangle \{111\}$ des plans $\{111\}$ vers les plans $\{100\}$. Ce type de glissement, appelé aussi « verrou de Kear-Wiltsdorf », est dû à des considérations de stabilité énergétique : le glissement dans les plans $\{100\}$ ne s'accompagnent pas de la violation

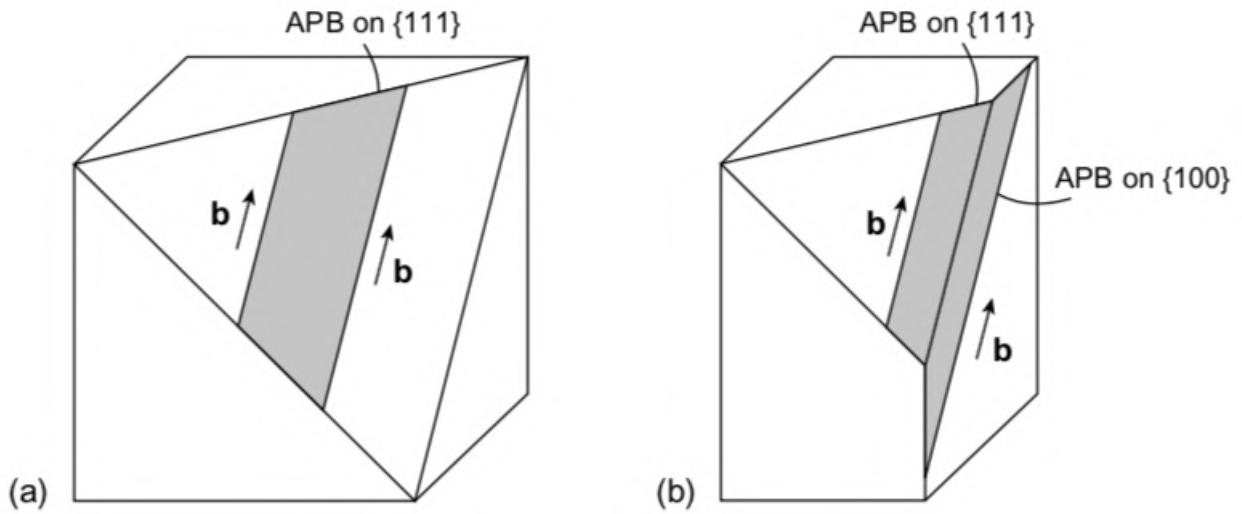


FIGURE 3.2 – (a)-glissement de deux super-partielles séparées par un paroi d'antiphase (APB) dans les plans $\{111\}$. (b)-glissement dévié d'une super-partielle et formation d'APB dans les plans $\{100\}$ [Hull and Bacon, 2001].

de liaisons entre atomes voisins. De ce fait, l'énergie des APBs sera moins élevée dans les plans $\{100\}$ que dans les plans $\{111\}$. Ce glissement entraîne souvent une résistance supplémentaire (augmentation de la contrainte) dans le matériau avec l'augmentation de la température. Ce type de comportement est connu sous le nom d'anomalie de contrainte [Thornton, 1970, Pope and Ezz, 1984, Veyssière and Saada, 1996, Reed, 2008]. C'est la raison pour laquelle, ces précipités (γ') jouent un rôle important dans la tenue en mécanique des superalliages base nickel à hautes températures.

Toujours pour des raisons de stabilité, une dissociation supplémentaire des super-partielles de type $1/2 \langle 110 \rangle \{111\}$ peut se produire, donnant alors naissance à des super-partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle \{111\}$ selon l'équation 3.2.

$$[\bar{1}01] \Rightarrow 1/6[\bar{1}\bar{1}2] + 1/6[\bar{2}11] + 1/6[\bar{2}11] + 1/6[\bar{1}\bar{1}2]. \quad (3.2)$$

Dans ce cas, on obtient quatre dislocations super-partielles de Shockley, deux défauts d'empilement complexes (CSF) séparés par une paroi d'antiphase (APB) (Figure 3.3a). Un autre type de dissociation qui peut se produire est une division du super-dislocation $\langle 110 \rangle$ en six super-partielles de Shockley $1/6 \langle 110 \rangle \{111\}$ séparées par deux CSFs, deux APBs et un défaut d'empilement super-intrinsèque (SISF) (Figure 3.3b). Il peut se produire également une dissociation en deux dislocations de type $1/3 \langle 211 \rangle$ séparées par un SISF, à la place d'un APB séparant deux dislocations super-partielles de type $1/2 \langle 110 \rangle \{111\}$ (Figure 3.3c). Il est également possible d'obtenir quatre dislocations séparées par un SISF et un défaut d'empilement super-extrinsèque (SESF, pour *superlattice extrinsic staking*

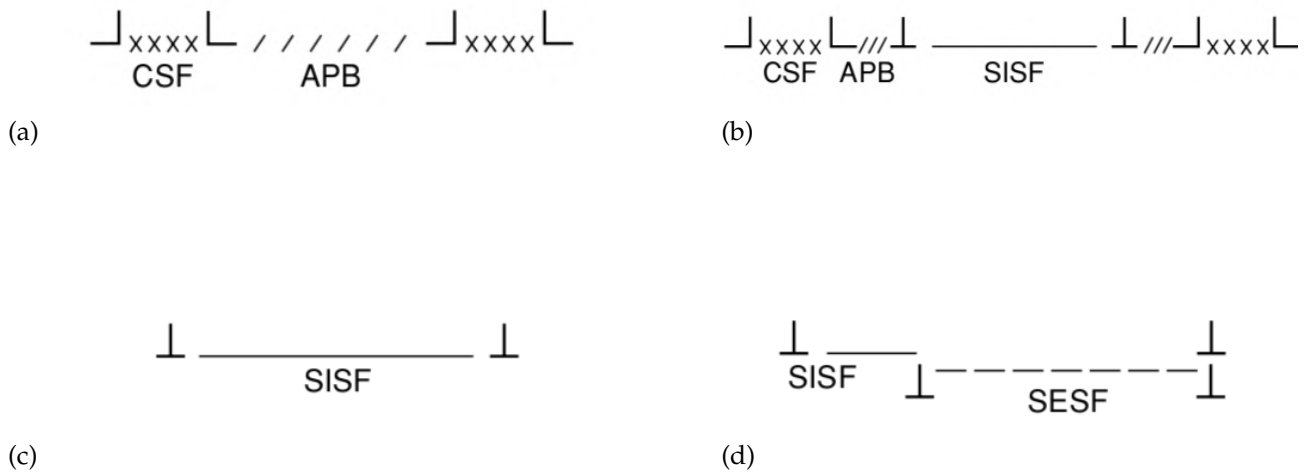


FIGURE 3.3 – Modes de dissociation d'une super-dislocation $\langle 110 \rangle$: (a)- dissociation en quatre dislocations super-partielles de Shockley séparées par deux (CSF) et une (APB), (b)-dissociation en six super-partielles de Shockley $1/6 \langle 110 \rangle \{111\}$ séparées par deux CSFs, deux APBs et un (SISF), (c)-dissociation en deux dislocations de type $1/3 \langle 211 \rangle$ séparées par un SISF, (d)-dissociation en quatre dislocations de type $1/3 \langle 211 \rangle$ séparées par un SISF et un SESF [Reed, 2008].

faults) dans les plans $\{111\}$ suite à des changements au niveau la séquence d'empilement (Figure 3.3d).

D'autres modes de dissociation [Thornton, 1970, Staton-Bevan and Rawlings, 1975], et de déformation tels que le maclage [Kovarik et al., 2009] peuvent aussi se produire, et ceci dépendant à la fois des conditions et du type de sollicitation auxquelles le matériau est confronté.

COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES NANOPARTICULES DE Ni_3Al À TEMPÉRATURE AMBIANTE

Pour décrire le comportement mécanique des nanoparticules de Ni_3Al , nous avons considéré trois paramètres (taille, forme et orientation cristallographique).

Des observations microscopiques sur la microstructure des superalliages base nickel ont montré que les précipités pouvaient avoir différentes tailles allant du micron au dizaine de nanomètre avec différentes formes (cubiques, cubes arrondis, sphéroïdes ...) [Caron, 2016, Durand-Charre, 2017, Fan et al., 2018].

Les orientations de types $\langle 100 \rangle$ sont celles qui sont le plus souvent considérées dans l'étude du comportement mécanique des superalliages monocristallins du fait qu'elle permet d'avoir de bonnes propriétés en terme d'équilibre entre les propriétés en fatigue, fluage

et traction [Zhang et al., 2019]. Néanmoins, en fonction des propriétés qui sont étudiées, le matériau peut être sollicité selon d'autres directions [Lall et al., 1979, Wang et al., 2003, Chiu and Ngan, 2002, Sawant and Tin, 2008], puisque la direction de chargement peut varier en fonction du type de sollicitation que subit le matériau selon son emplacement dans le moteur lors de son utilisation.

Avec l'utilisation de la technique de dynamique moléculaire, pour simuler ces essais de compression, on utilise un champ de force. Dans le cadre de cette étude, le champ de force initiale (*IFF*) décrit dans la partie méthodologie (réf. section 2 du chapitre 2) est utilisé, car le champ de Morse (*MFF*) étant de type paire, son utilisation ne peut se faire qu'en ayant une structure (nanoparticule) composée d'un seul type d'atome [Morse, 1929a]. Néanmoins, les études effectuées sur l'influence du modèle de champ de force utilisé pour la compression des nanoparticules d'aluminium (ref. chapitre 2, section 2) ont montré que dans les directions de sollicitation $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$, mis à part l'effet de retard observé, les comportements obtenus pour ces deux modèles de champ de force à température ambiante (300K) sont similaires.

Comportement des nano-cubes et nano-cubes arrondis de Ni_3Al

Rappel des éléments connus

La question de l'existence d'un effet de taille et/ou de forme sur le comportement mécanique des nanoparticules a fait l'objet de plusieurs études [Salah et al., 2017, Kilymis et al., 2018]. En revanche, concernant le précipité Ni_3Al , hormis quelques études expérimentales effectuées sur des particules de taille micrométrique soulignant l'existence d'un effet de taille [Maaß et al., 2012], les seules investigations conduites visant à étudier ces effets ont été effectuées par [Amodeo and Lizoul, 2017]. Ces auteurs ont souligné l'absence d'un effet de taille ainsi qu'une dépendance du comportement mécanique par rapport à la variation de la géométrie de surface. Les études ont été conduites sur des nano-cubes parfaits et arrondis. Ils ont montré que, quelle que soit la taille, l'arrondissement des coins et des arêtes des nano-cubes de Ni_3Al conduisait à une augmentation de la rigidité et de la résistance mécanique, et qu'à partir d'un certain seuil d'arrondissement, on pouvait avoir une transition d'un mode de déformation hétérogène (marqué par la nucléation de dislocations partielles de Shockley à partir des coins) à un mode de déformation homogène (qui commence avec la nucléation de dislocations partielles de Shockley au centre de la nanoparticule), comme illustré sur la Figure 3.4. Les calculs ont été effectués à 5K selon l'orientation $\langle 001 \rangle$ et il a été noté dans [Amodeo and Lizoul, 2017] que les vérifications

faites à 300K ont données des comportements similaires.

Vu que ces nano-précipités ont un rôle très important dans la tenue mécanique des super-

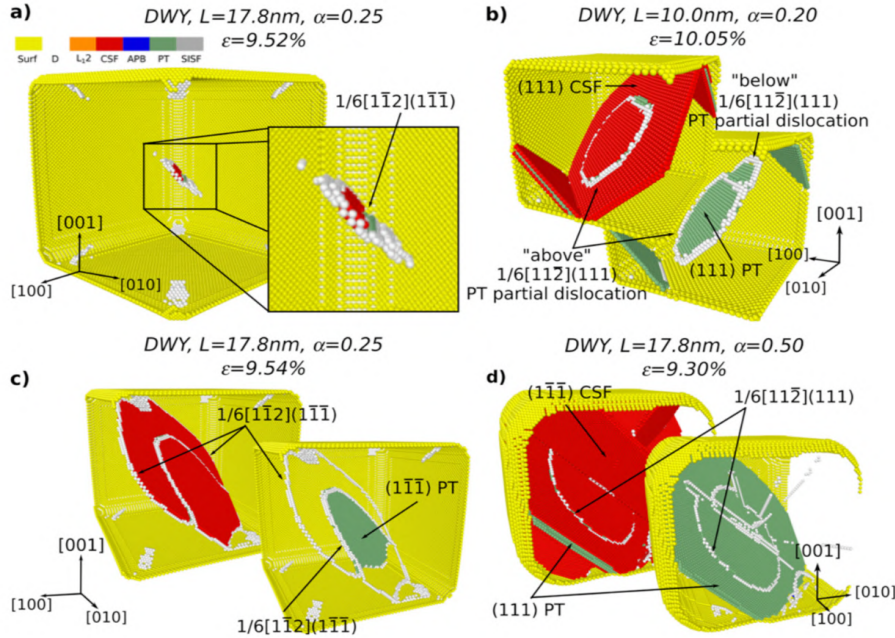


FIGURE 3.4 – Mode de déformation homogène : nucléation de dislocations au centre de la nanoparticule dans des nano-cubes arrondis de Ni_3Al de taille L à partir d'un certain coefficient d'arrondissement α [Amodeo and Lizoul, 2017].

alliages et sachant qu'ils peuvent subir des sollicitations mécaniques dans diverses directions selon leur emplacement lors de leur utilisation, après comparaison entre les résultats issus de [Amodeo and Lizoul, 2017] et ceux obtenus dans ce travail à température ambiante, l'influence de l'orientation cristallographique sur le comportement mécanique et particulièrement sur ce mode de déformation homogène est étudié.

Conditions d'apparition d'un mode de déformation homogène

A travers la Figure 3.5c, on peut remarquer d'après [Amodeo and Lizoul, 2017] que plus la taille est grande, plus le coefficient d'arrondissement requis pour avoir une mode de déformation homogène est élevé et donc plus on s'éloigne de la possibilité d'avoir ce mode de déformation. Dans le cadre de cette étude, il a été choisi de se limiter aux tailles pour lesquelles ce mode de déformation est observé (c'est-à-dire des tailles comprises entre $5nm$ et $20nm$). Trois cylindres de rayon r_c pour arrondir les arêtes et une sphère de rayon r_s pour l'arrondissement des coins sont sélectionnés. Le coefficient d'arrondissement utilisé

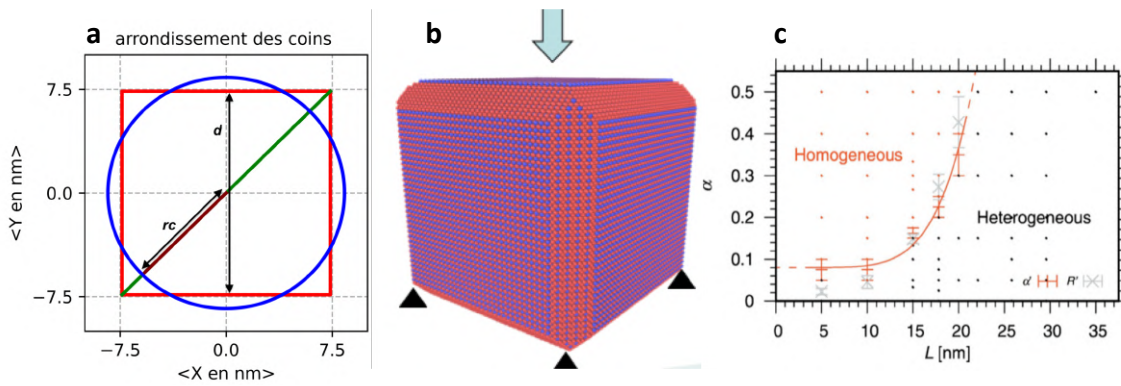


FIGURE 3.5 – (a)-méthode d'arrondissement des coins et des arêtes utilisée dans le cadre de cette étude, (b)-conditions aux limites fixées pour la compression des nanoparticules, (c)- Mode de déformation en fonction de la taille et du coefficient d'arrondissement.

pour l'arrondissement des coins et des arêtes des cubes est défini selon l'expression :

$$\alpha = \frac{d\sqrt{3} - 2r_s}{d(\sqrt{3} - 1)} = \frac{d\sqrt{2} - 2r_c}{d(\sqrt{2} - 1)}. \quad (3.3)$$

Dans cette expression d représente la taille du nano-cube (distance entre deux centres atomiques se trouvant dans deux faces opposées), r_s et r_c représentent respectivement les rayons de la sphère et du cylindre utilisés pour l'arrondissement des coins et des arêtes. La Figure 3.5a montre le schéma explicatif de cette méthode d'arrondissement sur un nano-cube de 15nm de taille.

Les conditions aux limites appliquées sont aussi représentées sur la Figure 3.5b. Pour tous les tests de compression, la plaque du bas est fixée et celle du haut est déplacée vers la nanoparticule à une vitesse de déformation de 10^8s^{-1} . Pour chaque taille, plusieurs coefficients d'arrondissement sont testés, avec trois graines aléatoires pour chaque calcul. Les courbes de chargement obtenues sont représentées sur les Figures 3.6 et 3.7. Les surfaces de contact sont définies de la même manière que dans [Amodeo and Lizoul, 2017] pour l'évaluation des contraintes. A travers ces figures, il apparaît que les résultats obtenus sont similaires à ceux présentés dans [Amodeo and Lizoul, 2017], c'est-à-dire une diminution de la force ainsi qu'une augmentation du module et de la limite d'élasticité lorsque le coefficient d'arrondissement augmente. Ce comportement a été justifié par le fait que lorsque les cubes sont arrondis, une compétition s'opère entre la diminution de la surface de contact et de la force appliquée. Comme la diminution enregistrée avec la surface de contact est plus importante que celle obtenue avec la force, les contraintes obtenues apparaissent plus importantes avec l'arrondissement.

Concernant le mécanisme de plasticité, les calculs effectués à 5K ont donné des résultats

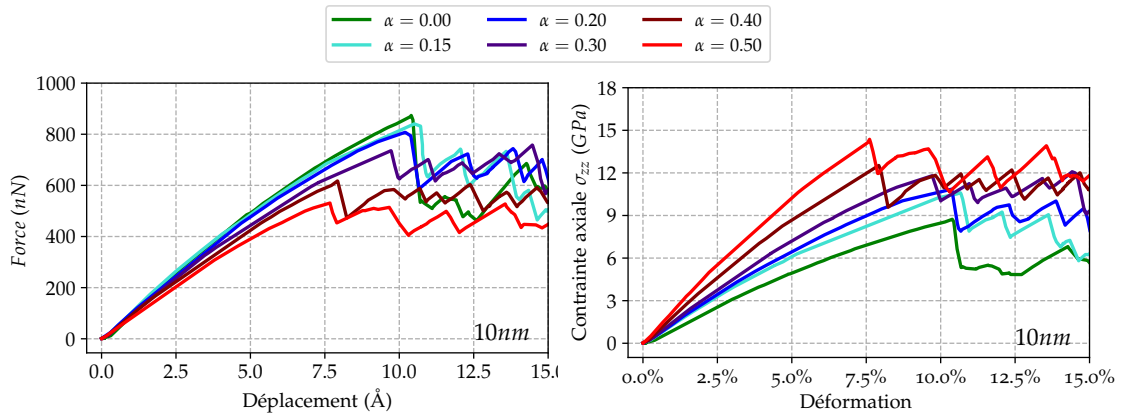


FIGURE 3.6 – Évolution de la force et de la contrainte respectivement en fonction du déplacement et de la déformation d'un nano-cube de 10nm de taille en fonction de ses coefficients d'arrondissement.

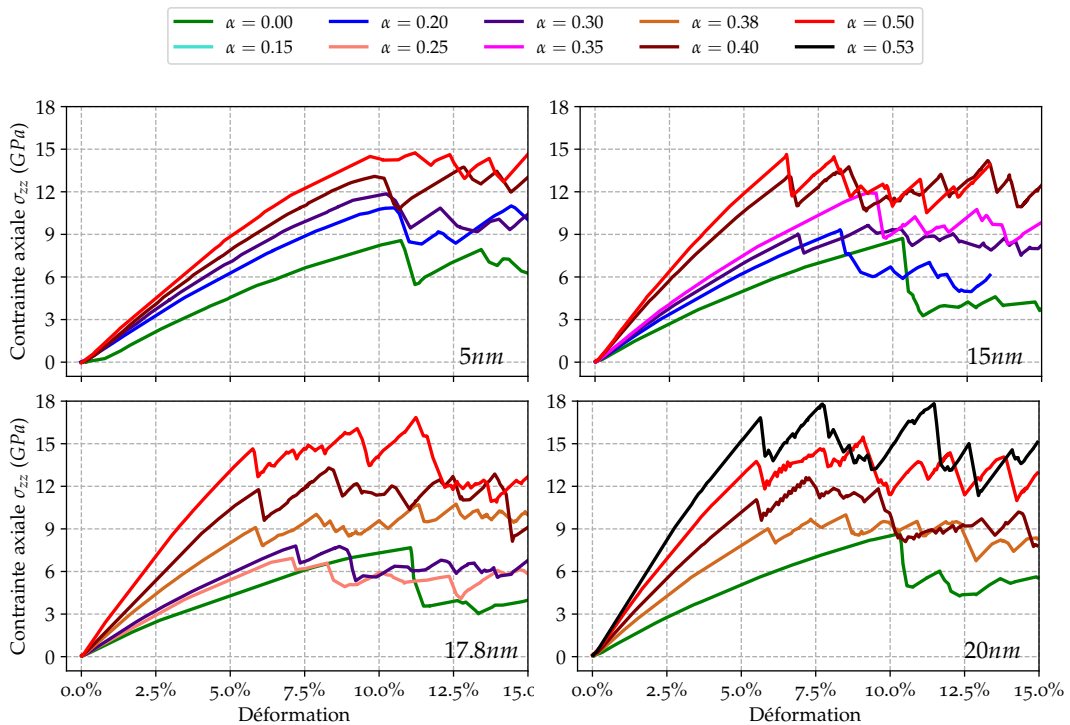


FIGURE 3.7 – Évolution de la contrainte en fonction de la déformation pour les nano-cubes de tailles (5nm, 15nm, 17.8nm, 20nm) selon leurs coefficients d'arrondissement.

qui sont en accord avec ceux obtenus dans [Amodeo and Lizoul, 2017], malgré le fait que les coefficients d'arrondissement testés avec des nanoparticules de $17.8nm$ et de $20nm$ n'ont pas conduit, dans notre étude, à des modes de déformations homogènes commençant avec de la nucléation de dislocations au centre de la nanoparticule.

En revanche, en comparant nos résultats obtenus à $300K$ avec ceux obtenus à $5K$, quelques différences sont à souligner sur les modes de déformation des nanoparticules de tailles $5nm$, $10nm$ et $15nm$ pour lesquelles il apparaît des modes de déformation homogènes à $5K$ commençant avec de la nucléation de dislocations au centre de la nanoparticule. Par exemple, pour les nanoparticules de $5nm$ de taille, avec un coefficient d'arrondissement de 0.20 , il a été observé une transition d'un mode de déformation homogène à un mode de déformation hétérogène à une température comprise entre $190K$ et $200K$. Pour un coefficient d'arrondissement de 0.30 , la transition est observée entre $230K$ et $240K$. En revanche, pour les autres coefficients (0.40 et 0.50), les mêmes modes de déformations (homogènes) sont observés à $5K$ et à $300K$. Pour les nanoparticules de $10nm$ de taille, avec un coefficient de 0.15 , la transition d'un mode de déformation homogène à un mode de déformation hétérogène est observée entre $190K$ et $200K$. Avec un coefficient de 0.20 , elle est observée entre $110K$ et $120K$. Et pour des tailles de $15nm$, avec un coefficient de 0.35 , une transition est observée entre $50K$ et $60K$. Ce résultat révèle l'existence d'une température de transition entre $5K$ et $300K$.

D'après ces résultats, il semble raisonnable d'affirmer qu'il n'y a pas de dépendance linéaire pour toutes les tailles de cette température de transition en fonction des coefficients d'arrondissement. En revanche, on note que plus la taille est petite, plus la température de transition est élevée. Les courbes de chargement à différentes températures comprises entre $5K$ et $300K$ pour une nanoparticule de $10nm$ de taille avec un coefficient d'arrondissement de 0.20 sont représentées dans la Figure 3.8. L'analyse de cette figure suggère que les comportements obtenus restent similaires pour des températures allant de $5K$ à $200K$. En revanche, pour des températures qui sont au-dessus de $200K$ ($250K$ et $300K$), il est à noter une diminution de la limite d'élasticité. En ce qui concerne les mécanismes de plasticité, il se forme une structure juste avant la nucléation au centre de la nanoparticule et au niveau des coins (Figure 3.9a). Cette structure révèle l'existence d'une probabilité non nulle d'avoir de la nucléation de dislocations à l'endroit où elle s'est formée. Une concentration de contrainte est observée dans cet endroit au début de la nucléation de dislocations (Figure 3.9b). Lorsque la température augmente, cette concentration de contrainte diminue Figure 3.9c et disparaît après l'étape de transition vers un mode de déformation hétérogène (Figure 3.9d).

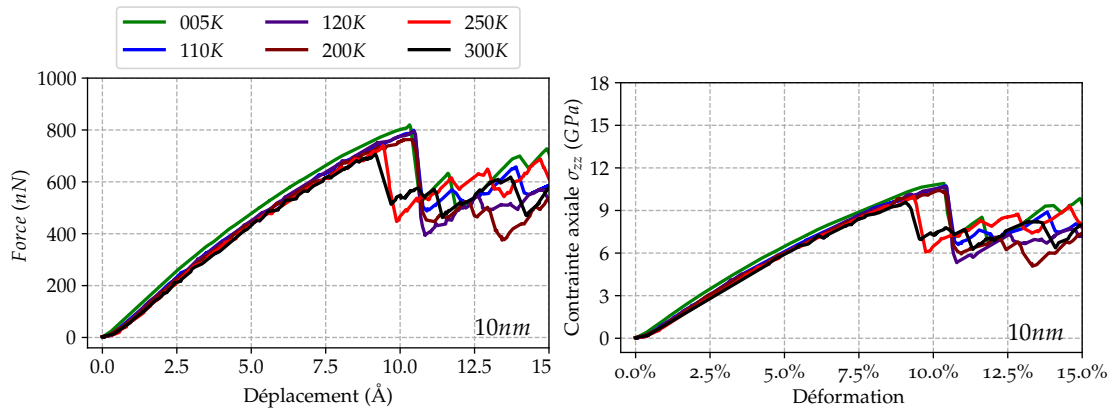


FIGURE 3.8 – Évolution de la force et de la contrainte respectivement en fonction du déplacement et de la déformation entre 5K et 300K pour un nano-cube de 10nm de taille avec un coefficient d'arrondissement de 0.20.

Il faut cependant noter que cette structure est parfois observée même si la température atteint un certain seuil où il n'y a plus de nucléation de dislocations au centre de la nanoparticule. Cependant, la structure diminue et finit par disparaître avec l'augmentation de la température. Autrement dit, l'analyse qui est effectuée ci-dessus repose sur le fait que seuls les modes de déformation où la nucléation de dislocations au centre de la nanoparticule est observée, sont considérés comme homogènes. Et donc, si nous considérons comme modes de déformation homogènes tous les modes de déformation dans lesquels une structure est observée au centre de la nanoparticule, alors les zones de transition vont augmenter. Par exemple pour les nanoparticules de 5nm de taille, cette structure est observée à 300K pour tous les coefficients d'arrondissement. Pour les nanoparticules de 10nm de taille, elle est observée également pour tous les coefficients d'arrondissement sauf pour un coefficient de 0.20 où elle disparaît à une température comprise entre 200K et 250K pour deux graines aléatoires sur les trois testées. Pour les nanoparticules de 15nm de taille, cette transition est observée avec un coefficient de 0.35 à une température comprise entre 100K et 150K pour toutes les graines aléatoires testées. Pour les nanoparticules de 17.8nm et de 20nm de taille, aucune structure n'est observée au-delà de 50K pour tous les coefficients testés. Ce changement de mode de déformation observé avec l'augmentation de la température peut être attribué à la difficulté de transmissibilité de la contrainte, des coins au centre de la nanoparticule, du fait de l'augmentation de l'agitation du système.

En ce qui concerne la définition de la surface de contact, il est important de déterminer son impact sur la variation du comportement du fait de l'arrondissement des nanoparticules. Les nanoparticules ayant des géométries complexes telles que les sphères ou les polyèdres de Wulff, on note une variation non négligeable de leur surface de contact lors

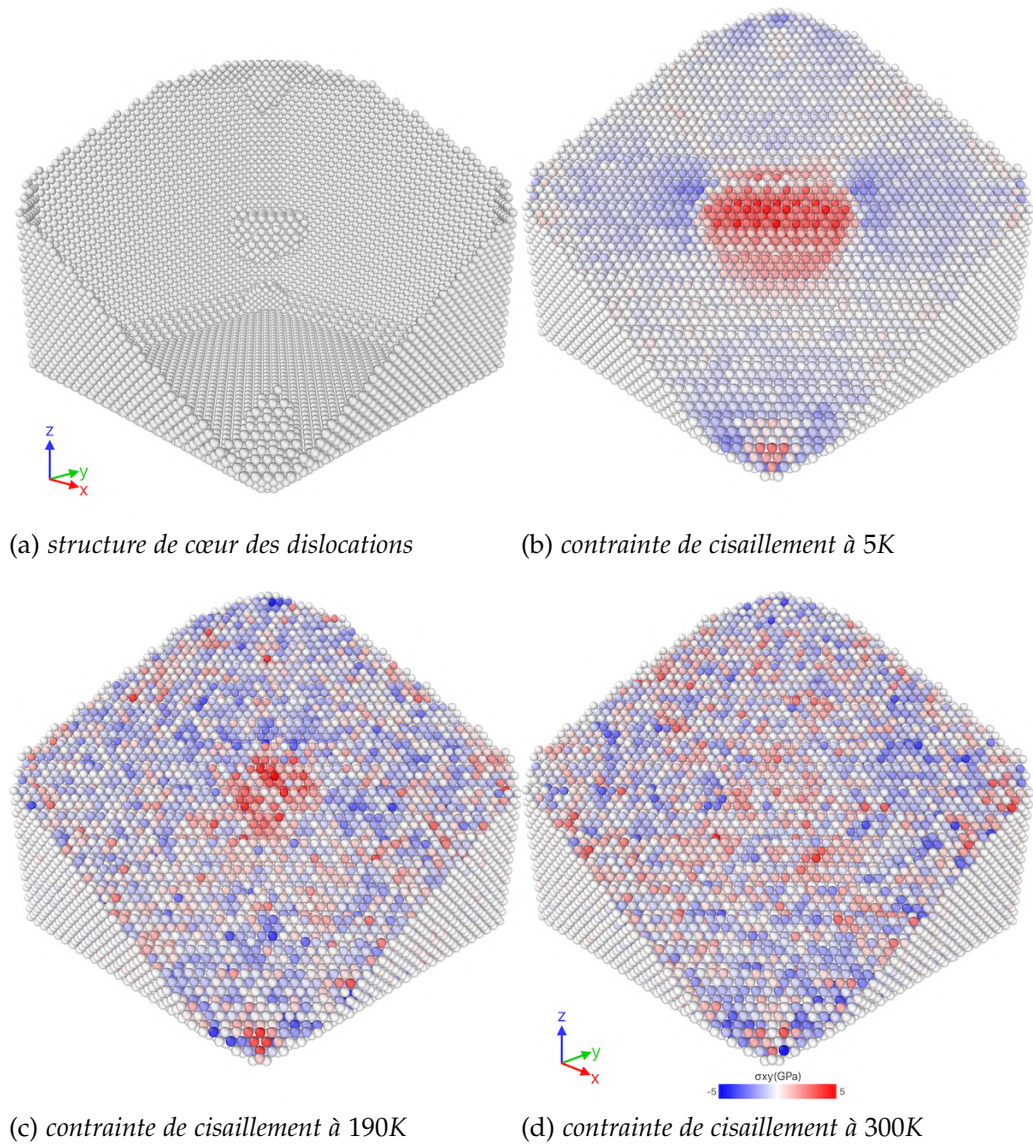


FIGURE 3.9 – Nanoparticule de 10nm de taille avec un coefficient d'arrondissement de 0.15 : (a)-structure de cœur des dislocations au niveau des sites de nucléation juste avant les premiers événements plastiques, (b), (c), (d)-évolution de la contrainte de cisaillement juste avant nucléation en fonction de la température.

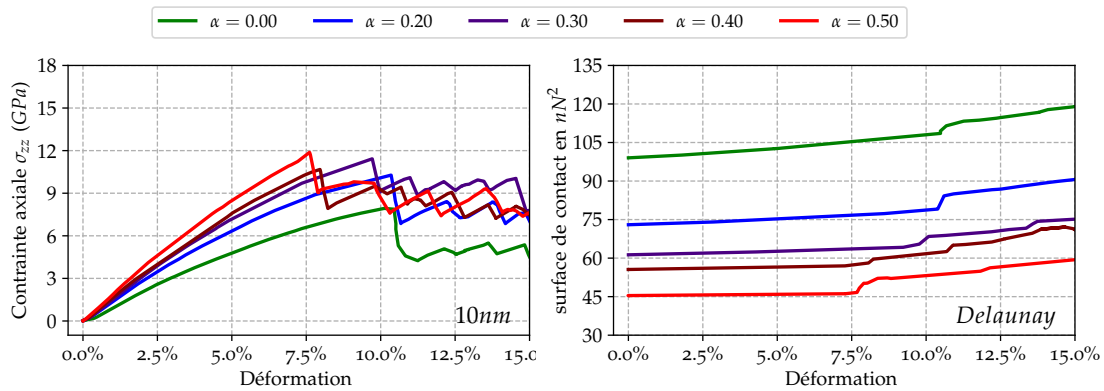


FIGURE 3.10 – Variation du comportement et de la surface de contact (calculée en se basant sur la méthode de la triangulation Delaunay utilisée dans [Kilymis et al., 2018]) en fonction de la déformation pour différents coefficients d'arrondissement.

de leur compression [Salah et al., 2017, Kilymis et al., 2018]. Sachant que l'arrondissement des cubes rapproche ces derniers d'une forme sphérique, il est attendu une variation non linéaire de leur surface de contact lors de leur compression surtout pour des coefficients d'arrondissement assez élevés.

Pour évaluer l'influence de la définition de la surface de contact sur la variation du comportement dû à l'arrondissement des nano-cubes, il a été utilisé la méthode de la triangulation de Delaunay définie dans la section 2 du chapitre 2. Cette méthode est différente de celle utilisée dans [Amodeo and Lizoul, 2017]. En effet dans [Amodeo and Lizoul, 2017], les auteurs considèrent la surface formée par la première couche atomique qui est en contact avec le champ de force au début de la compression pour définir la surface de contact. Tandis que la méthode basée sur la triangulation de Delaunay recalcule à chaque niveau de déformation la nouvelle surface en contact avec le champ de force pendant la compression. Cette dernière méthode a été utilisée dans [Kilymis et al., 2018]. La Figure 3.10 montre les variations des contraintes et des surfaces calculées à partir de la méthode de la triangulation de Delaunay en fonction du coefficient d'arrondissement.

En comparaison avec les résultats présentés sur la Figure 3.6, malgré la variation de la surface de contact observée au début de la plasticité, les résultats obtenus restent similaires : il est constaté une diminution de la surface de contact ainsi qu'une augmentation de la rigidité et de la limite d'élasticité avec l'augmentation du coefficient d'arrondissement. Néanmoins, en s'intéressant aux ordres de grandeur, il est clair que les valeurs de contrainte obtenues avec la méthode de la triangulation de Delaunay sont nettement moins importantes que celles obtenues avec la méthode utilisée dans [Amodeo and Lizoul, 2017].

Dans la littérature consacrée à l'étude du comportement mécanique des nanoparticules isolées, un mode de déformation hétérogène débutant avec de la nucléation de disloca-

tions au niveau des surfaces de contact a toujours été considérée comme étant le mode déformation par défaut [Salah et al., 2017, Bian and Wang, 2013, Kilymis et al., 2018]. Les résultats obtenus dans ce travail soutiennent qu'il peut y avoir l'activation d'autres sites de nucléation comme celui observé au niveau du centre de certains nano-cubes arrondis de Ni_3Al . Cependant une question importante est de savoir quel serait l'effet de l'orientation de l'axe de sollicitation sur le comportement mécanique de ces nano-cubes arrondis, et plus particulièrement sur le mode de déformation homogène.

Influence de l'orientation de l'axe de sollicitation

Comportement mécanique

Pour étudier l'impact de l'orientation de l'axe de sollicitation sur le comportement mécanique des nano-cubes de Ni_3Al , trois orientations de sollicitation sont testées : [001], [110] et [111]. Les sollicitations ont été effectuées en fixant la direction de chargement et en générant des cubes d'orientations cristallographiques différentes suivant la même méthode que celle utilisée dans la section 2 du chapitre 2. Des tailles et coefficients d'arrondissement correspondants à l'apparition des modes de déformation homogène dans la direction [001] sont considérés. Des coefficients d'arrondissement allant de 0.20 à 0.40 sont testés pour les nano-cubes de tailles 5nm, 10nm et 15nm. Les courbes de chargements sont présentées à la Figure 3.11 .

Il apparaît clairement que le comportement obtenu selon la direction [001] est différent de ceux obtenus suivant les directions [110] et [111]. Les pentes obtenues selon les directions [110] et [111] sont linéaires contrairement à la pente observée selon la direction [001]. De même le module et la limite d'élasticité sont moins importants suivant cette dernière direction que selon les directions [110] et [111] quels que soient la taille et le coefficient d'arrondissement. En comparant les comportements selon les directions [110] et [111], il s'avère que le module d'élasticité reste plus important dans la direction [111] que dans la direction [110]. En revanche, pour la limite d'élasticité, diverses tendances se manifestent. Plus particulièrement, pour un nano-cube arrondi de 15nm, avec un coefficient d'arrondissement de 0.35, des limites d'élasticités similaires sont obtenues. Même si on note une limite d'élasticité plus importante dans la direction [110] que dans la direction [111] pour un nano-cube de 10nm de taille, avec un coefficient d'arrondissement de 0.40, pour un nano-cube de 5nm avec le même coefficient d'arrondissement, la tendance inverse est observée.

En fixant la taille à 15nm par exemple, tout en faisant varier le coefficient d'arrondisse-

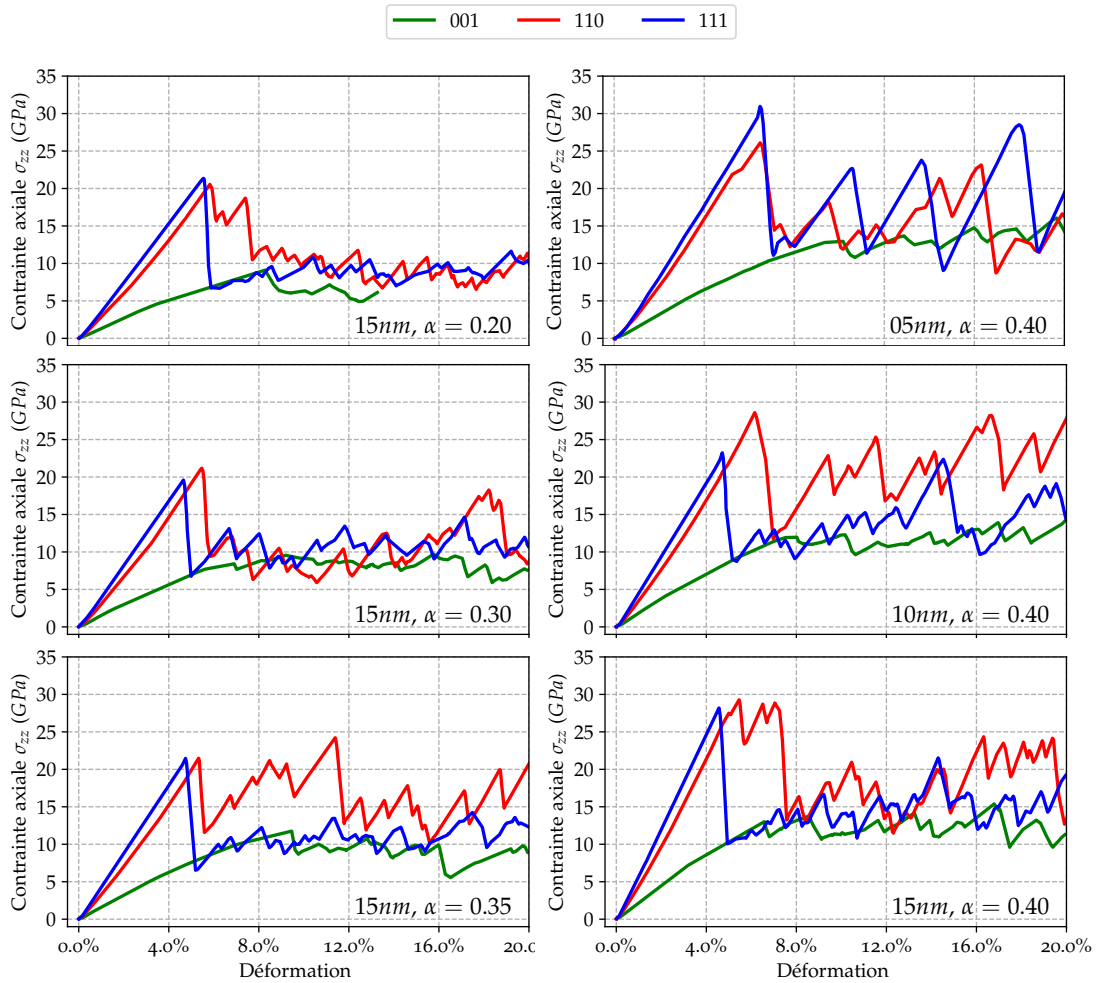


FIGURE 3.11 – Évolution du comportement mécanique en fonction de l'orientation cristallographique pour différentes tailles et différents coefficient d'arrondissement

ment de 0.20 à 0.40, il est constaté une faible variation de la différence entre les limites d'élasticité dans les directions [110] et [111], ce qui n'est pas le cas en faisant varier la taille pour un même coefficient. Néanmoins, quel que soit le paramètre testé (taille ou coefficient d'arrondissement), la tendance obtenue sur les écarts entre les limites d'élasticité selon les directions [110] et [111] est non linéaire. Les calculs effectués à faible température (5K) et à température ambiante (300K) ont montré des résultats tout à fait similaires. D'ailleurs, ces résultats obtenus sur les différences entre les modules et les limites d'élasticités sont en accord avec ceux présentés dans [Xiong et al., 2016].

Pour connaître l'influence de l'orientation de l'axe de sollicitation sur le mode de déformation, il est nécessaire de s'intéresser aux mécanismes de plasticité.

Mécanisme de plasticité

En testant selon les directions $[110]$ et $[111]$ les mêmes tailles et coefficients d'arrondissement qui ont donné des modes de déformation homogène selon la direction $[001]$, il a été observé que le mécanisme de plasticité, de même que ce mode de «déformation homogène» en particulier, dépendent fortement de l'orientation cristallographique. En effet, selon les directions $[110]$ et $[111]$ pour tous les coefficients testés, aucun mode de déformation homogène n'a été obtenu. Il apparaît plutôt un mode de déformation hétérogène piloté par du glissement de paires de dislocations partielles de Shockley.

Dans la direction $[001]$, le résultat obtenu est similaire à celui présenté dans [Amodeo and Lizoul, 2017] (Figure 3.12). Il est observé un mode de déformation homogène qui commence avec la nucléation d'une dislocation au centre du nano-cube. Cette dernière se propage rapidement vers la surface de la nanoparticule en créant des défauts d'empilements complexes (CSFs) dans le plan de propagation (voir les Figures 3.12a et 3.12b). Lorsque l'on augmente le chargement, d'autres dislocations nucléées à partir des coins se propagent vers l'intérieur du nano-cube laissant derrière elles des CSFs (Figure 3.12c). Pour des niveaux de déformation plus élevés, il se forme des pseudo-macles (PTs) (structures initiant la formation de macles) entre les CSFs qui augmentent avec le chargement, ainsi que des parois d'antiphase (APBs) suite aux glissements d'autres dislocations dans les plans adjacents aux plans où les CSFs se sont formés. Dans la direction $[110]$, le

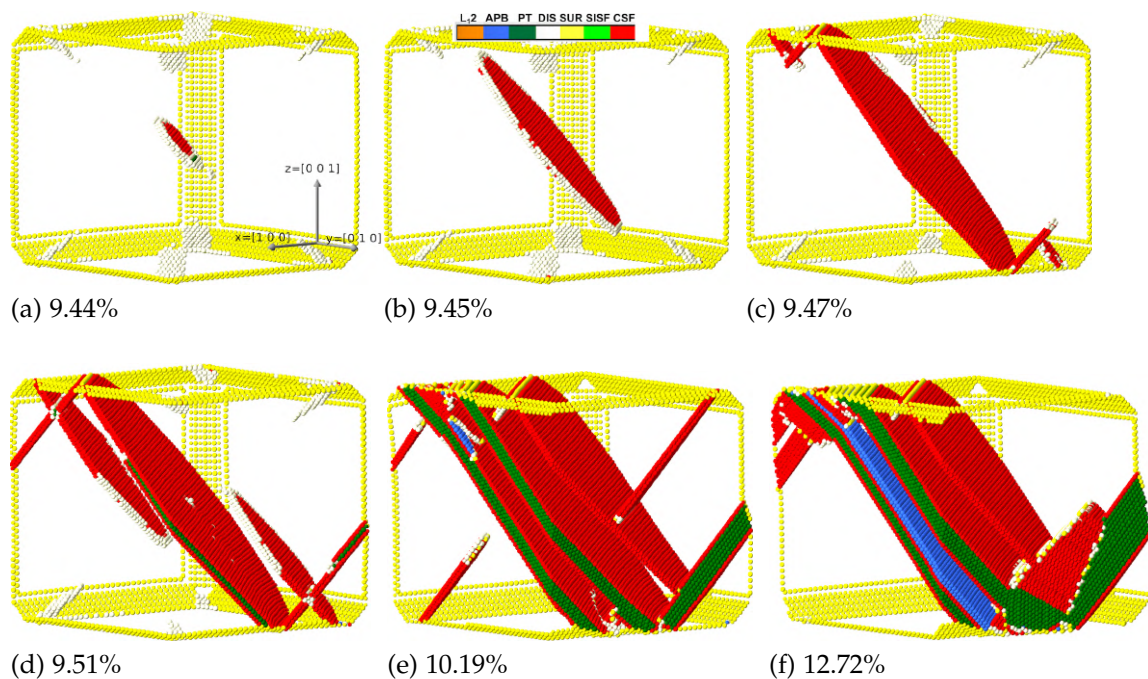


FIGURE 3.12 – Évolution du mécanisme de plasticité pour un nano-cube arrondi de 15nm de taille avec un coefficient d'arrondissement de 0.35 sollicitée dans la direction $[001]$.

mécanisme obtenu est différent de celui observé dans la direction $[001]$. Le résumé des mécanismes de plasticité pour un nano-cube de $15nm$ de taille avec un coefficient d'arrondissement de 0.35 est présenté à la Figure 3.13. Le mode de déformation est hétérogène et débute avec la nucléation de dislocations au niveau des arêtes et près des coins (Figure 3.13a). Pour un niveau de déformation de 5.61% , la nucléation d'une autre dislocation apparaît et va former une paire avec la première dislocation. Les deux vont se propager ensemble vers la surface de la nanoparticule en laissant derrière elles une *APB* (Figure 3.13b).

Si on augmente le niveau de chargement, il est observé, à un taux de chargement de 5.67% , la nucléation de nouvelles dislocations à partir des arêtes ainsi que le glissement d'autres dislocations de Shockley dans les plans adjacents aux plans de formation des *APBs*. Ces dislocations entraînent la création de défauts d'empilement intrinsèques (*SISF*) (Figure 3.13c).

Avec le même mécanisme, pour des niveaux de déformation élevés, on assiste à la formation de *SISF* (contrairement à l'orientation $[001]$) et d'*APB* en grande quantité (Figure 3.13d, 3.13e et 3.13f). Des mécanismes similaires à ceux présentés ici ont été observés dans [Xiong et al., 2016].

Dans la direction $[111]$, il est retrouvé des mécanismes similaires aux mécanismes observés dans la direction $[110]$, mis à part que les quantités de défauts formés varient d'une orientation à une autre.

Les courbes de la Figure 3.14 montrent l'évolution des quantités de défauts pendant l'évolution des mécanismes de plasticité dans les trois directions considérées. On remarque que, si dans la direction $[001]$, les quantités de *CFS* et de *PT* formés sont plus importantes que les quantités de *SISF* et d'*APB*, dans les directions $[110]$ et $[111]$, la tendance inverse est observée : on forme plus de *SISF* et d'*APB* que de *PT* (Figure 3.14). Ceci s'explique par le fait qu'il y a plus de glissement par paires de dislocations selon les directions $[110]$ et $[111]$ que suivant la direction $[001]$ où un pilotage entier des premiers événements plastiques par du glissement individuel de dislocations partielles de Shockley est constaté. En comparant les quantités de défauts dans les directions $[110]$ et $[111]$ (Figure 3.14), on remarque la formation de plus de *SISF* et de moins d'*APB* dans la direction $[110]$ que dans la direction $[111]$.

La connaissance du type de défaut susceptible de se former selon l'axe de sollicitation est importante, car elle permet de mieux prédire les différents comportements que le matériau peut adopter.

Les résultats obtenus dans cette étude montrent que le comportement mécanique des

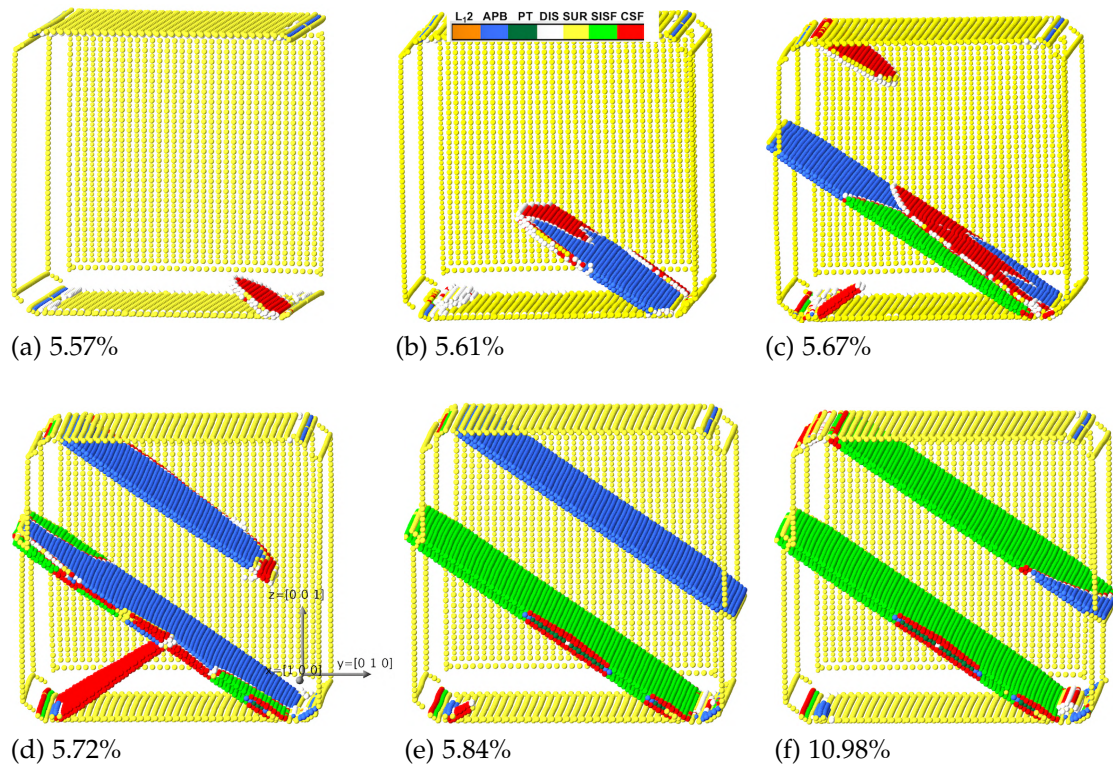


FIGURE 3.13 – Évolution du mécanisme de plasticité pour un nano-cube arrondi de 15nm de taille avec un coefficient d'arrondissement de 0.35 sollicitée dans la direction $[110]$.

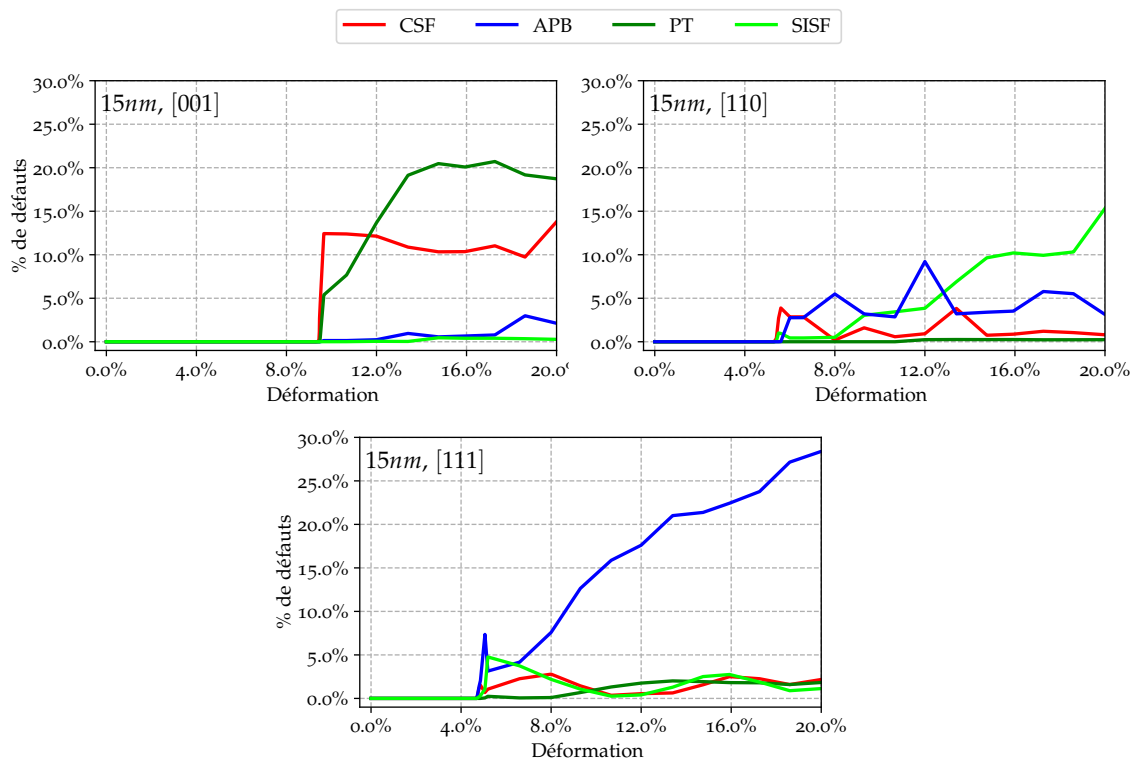


FIGURE 3.14 – Variation des quantités et types de défauts en fonction de la déformation selon l'orientation de l'axe de sollicitation.

nano-cubes arrondis de Ni_3Al , et particulièrement leur mode de déformation, sont fonction de l'orientation de leur axe de sollicitation. Si dans la direction [001] il est observé parfois un mode de déformation homogène, dans les directions [110] et [111], seuls des modes de déformations hétérogènes ont été obtenus.

Le mécanisme de plasticité dans la direction [001] est dominé par la formation de *CSFs* et de *PTs* tandis que dans les directions [110] et [111], il est plutôt gouverné par la formation d'*APBs* et de *SISFs*.

Comportement mécanique des nano-sphères de Ni_3Al

L'étude conduite sur les cubes et les cubes arrondis montre l'importance de la prise en compte de l'effet de la forme sur le comportement mécanique.

Des observations microscopiques ont montré que les précipités, retrouvés dans les superalliages peuvent avoir des formes sphériques surtout pour ceux de petites tailles [Fan et al., 2018, Göken and Kempf, 1999]. Connaître le comportement mécanique de ces derniers peut contribuer à accroître la connaissance et la maîtrise du comportement mécanique des matériaux dans lesquels ils sont contenus.

Comportement mécanique

De la même manière que pour les cubes arrondis, l'étude du comportement mécanique des nano-sphères de Ni_3Al a été conduite avec l'utilisation de l'*IFF* [Plimpton, 1995] présenté à la section 2 du chapitre 2 pour simuler la compression.

Dans la bibliographie consacrée à l'étude du comportement mécanique des nanoparticules isolées, on retrouve souvent certains types de comportement caractérisant les premiers événements plastiques des nano-sphères de structures *CFC* (*Ni*, *Cu*, *Al* . . .) dans les directions $\langle 001 \rangle$ qui sont :

- La formation de dislocations partielles de Shockley au tout début de la nucléation ;
- la formation d'une seule pyramide composée de dislocations de types sessiles issues de l'interaction entre les dislocations partielles de Shockley pour les nanoparticules de taille inférieure à $10nm$;
- la formation d'une double pyramide pour les nanoparticules de taille supérieure à $10nm$;
- l'absence de formation d'une troisième pyramide pour des nanoparticules de tailles plus grandes.

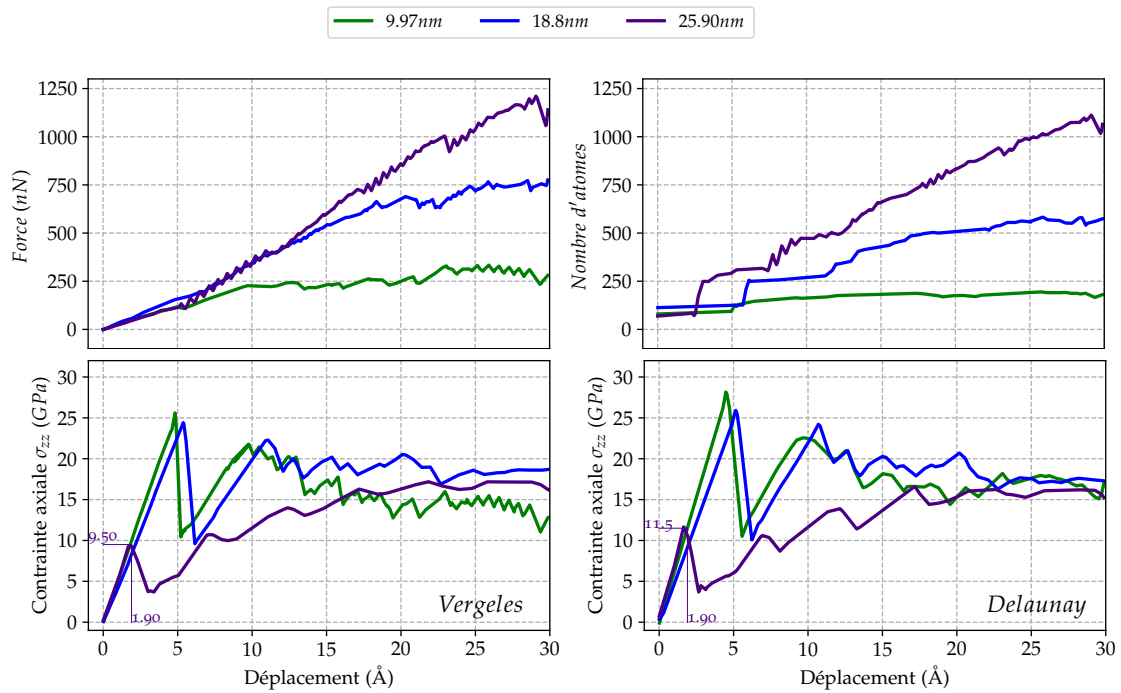


FIGURE 3.15 – Variation de la force appliquée (a), du nombre d'atomes (b), de la contrainte en appliquant la méthode de Vergeles (c) et en appliquant la méthode de la triangulation de Delaunay (d).

En se basant sur ces informations, trois tailles différentes (9.97nm, 18.8nm et 25.90nm) de nano-sphères de Ni_3Al ont été choisies. Puis, pour étudier leur comportement mécanique, des simulations de compression ont été effectuées. Les nano-sphères de Ni_3Al ont une structure cristallographique de type $L1_2$, laquelle contient deux types d'atomes, différente de celles des nano-sphères de structure CFC qui ne contiennent qu'un seul type d'atome. Il est donc intéressant de mener une étude afin de voir si les deux structures vont conduire à des comportements similaires ou différents.

Les courbes de chargement sont présentées sur la Figure 3.15. Pour évaluer les contraintes appliquées, les surfaces de contact sont calculées en utilisant deux méthodes à savoir la méthode de la triangulation de Delaunay et celle de Vergeles décrites à la section 2 du chapitre 2. L'évolution de la force en fonction du déplacement des atomes de surface de la nanoparticule, qui est le même que celui du champ de force, montre qu'au début du chargement, c'est-à-dire à un niveau de déplacement inférieure à 1.90 Å, l'intensité des forces reçues par les trois NPs de tailles différentes restent similaires. Ceci s'explique par le fait que le nombre d'atomes atteint par le champ de force pour les trois NPs à ce stade est proche (Figure 3.15). Car, comme expliqué au chapitre 2, le champ de force utilisé ici étant de type répulsif à contact, il n'agit que sur les atomes qu'il atteint ou dépasse, et dépend donc du nombre d'atomes impactés.

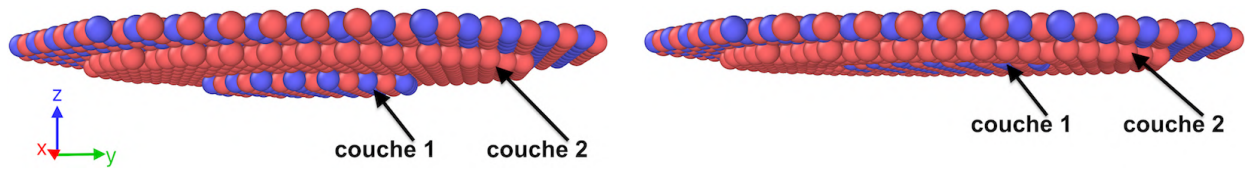


FIGURE 3.16 – Variation de la surface de contact par déplacement des atomes de la première couche vers la seconde couche.

A un niveau de déplacement de 1.90 \AA , il n'est pas observé une augmentation considérable de l'intensité de la force pour la nanoparticule de 25.90 nm , malgré une augmentation de la quantité d'atomes impactée par le champ de force à ce stade. En effet, l'augmentation du nombre d'atomes impactés par le champ de force, laquelle est due à un déplacement des atomes de la première couche (**couche 1**) vers la seconde couche (**couche 2**) (Figure 3.16) s'accompagne d'une diminution de l'intensité de la force. Ceci s'explique par le fait que la distance entre le champ de force et les couches atomiques diminue lors du déplacement des ces dernières. Le champ de force qui est proportionnel au carré de cette distance, diminue en conséquence lorsque cette distance diminue. De ce fait, l'augmentation de la force causée par l'augmentation du nombre d'atomes atteint, est compensée par la diminution de la force causée par la diminution de la distance entre le champ de force et les couches atomiques lors de leur déplacement.

Ce déplacement des atomes de la (**couche 1**) vers la (**couche 2**) s'accompagne naturellement d'une augmentation de la surface de contact qui se manifeste par une chute visible sur la courbe contrainte – déplacement (Figure 3.15).

Concernant l'évolution des contraintes, la Figure 3.17 montre que les méthodes de la triangulation de Delaunay et de Vergeles utilisées pour définir les surfaces de contact donnent des résultats similaires. Néanmoins, les contraintes obtenues avec la méthode de la triangulation de Delaunay sont un peu plus élevées que celles obtenues avec la méthode de Vergeles (Figure 3.17). Ceci est dû au fait que la surface calculée avec la méthode de la triangulation de Delaunay est moins importante que celle prédite avec la méthode de Vergeles au début du chargement, ce qui est cohérent puisque la méthode de Vergeles considère les couches comme étant circulaires alors qu'elles ne le sont pas parfaitement. En conséquence, cette méthode aura tendance à surestimer la surface.

La méthode de la triangulation de Delaunay se base uniquement sur le calcul de la surface des triangles définis entre les centres atomiques. Par conséquent, elle s'adapte mieux aux géométries même si elle peut avoir tendance à sous-estimer un peu la surface pour des rayons atomiques grands.

Pour des niveaux de déplacements de 5 \AA et 6.27 \AA , le même mécanisme observé pour la nanoparticule de 25.90 nm est observé respectivement pour les NPs de tailles 9.97 nm et

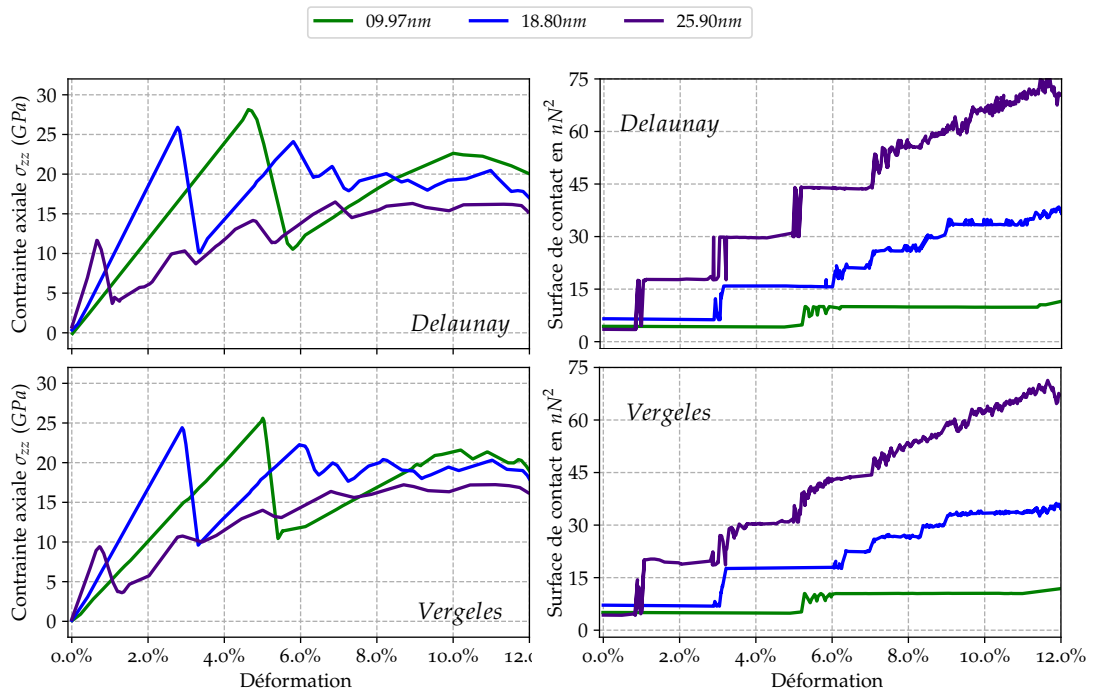


FIGURE 3.17 – Variation de la contrainte appliquée en fonction de la taille en utilisant la méthode de Vergeles et celle de la triangulation de Delaunay pour l'évaluation des surfaces.

18.8nm.

Il faut noter que plus la surface de la couche externe est grande (c'est-à-dire plus le nombre d'atomes au niveau de cette couche est importante), plus la force requise pour faire passer les atomes des couches externes vers les couches internes est grande. C'est la raison pour laquelle, pour des niveaux de chargement plus élevés (supérieurs à 15 Å par exemple), on note des intensités de forces plus importantes avec les NPs ayant des surfaces de couche (donc des nombres d'atomes) plus grandes (Figure 3.15).

En ce qui concerne les courbes de contrainte-déformation (Figure 3.17), il est observé une tendance différente de celle visible dans les courbes contrainte-déplacement (Figure 3.15). En effet une augmentation du module d'élasticité avec la diminution de la taille est notée. Pour un même niveau de déplacement, un taux de déformation plus important est obtenu avec les nanoparticules de petite taille comparées aux nanoparticules de plus grande taille. Ainsi, il va se produire un redressement plus important sur le module d'élasticité pour les nanoparticules de taille plus grande comparées à celles de taille plus petite.

L'analyse de l'évolution des courbes de chargement des nano-sphères de Ni_3Al obtenues a montré des comportements similaires à ceux observés habituellement dans les

nano-sphères de structure CFC ($Al, Cu, Ni...$) [Salah et al., 2017, Bian and Wang, 2013] mis à part quelques différences.

Leur mécanisme de plasticité et leur mode de déformation au début du chargement de même que pour des taux de compression plus élevés sont étudiés afin de les comparer aux autres formes (cubiques et cubiques arrondis), ainsi qu'aux autres matériaux de structure CFC ($Al, Cu, Ni...$).

Mécanisme de plasticité

L'étude des mécanismes de plasticité est réalisée en considérant pour chaque taille les modes de déformation de la nano-sphère en considérant des plages de déplacement comprises entre 0 Å et 30 Å, et des taux de déformation allant de 0 à environ 12%.

L'observation de l'évolution des premiers évènements plastiques montrent des modes de déformation similaires pour les trois tailles. La Figure 3.18 décrit l'évolution du mécanisme de plasticité au début de la compression pour une nano-sphère de 18.8nm de taille.

Le mécanisme de plasticité commence à un niveau de déformation de 3.38% avec la nucléation de dislocations partielles de Shockley au niveau des zones de contact (Figure 3.18a). Ces dernières vont se rencontrer par la suite pour former une pyramide composée de dislocations de Hirth ayant comme vecteur de Burgers $1/3 \langle 100 \rangle$ (Figure 3.18b et 3.18c). Ce mécanisme de déformation est similaire à celui observé habituellement dans les nano-sphères de structure CFC ($Al, Cu, Ni...$) [Salah et al., 2017, Bian and Wang, 2013].

À un taux de déformation de 6%, on assiste à l'ouverture de la tête de la pyramide sans dissociation des dislocations qui le constituent (Figure 3.18d). Ce mécanisme particulier n'est pas observé dans les nano-sphères de structure CFC ($Al, Cu, Ni ...$).

Juste après la coupure de la tête de cette pyramide à un taux de déformation de 6.10%, d'autres dislocations partielles de Shockley sont générées au niveau des zones de contact (Figure 3.18e) et vont s'intercepter pour former de manière individuelle les quatre arêtes de la seconde pyramide (Figure 3.18f et 3.18g) qui vont ensuite se joindre pour former une dislocation de type $1/3 \langle 110 \rangle$ au niveau du sommet de la seconde pyramide.

Pour des taux de compression plus élevés (7.77%), il est constaté la destruction de la seconde pyramide par dissociation des dislocations qui la constituent en dislocations partielles de Shockley, comme observé dans les nano-sphères de structure CFC [Salah et al., 2017, Bian and Wang, 2013]. Mais contrairement à ces dernières, ces dislocations peuvent s'intercepter encore pour former des dislocations sessiles de type $1/3 \langle 110 \rangle$ qui glissent difficilement dans la nano-sphère.

Ceci explique la raison pour laquelle la chute de contrainte observée sur la courbe à ce

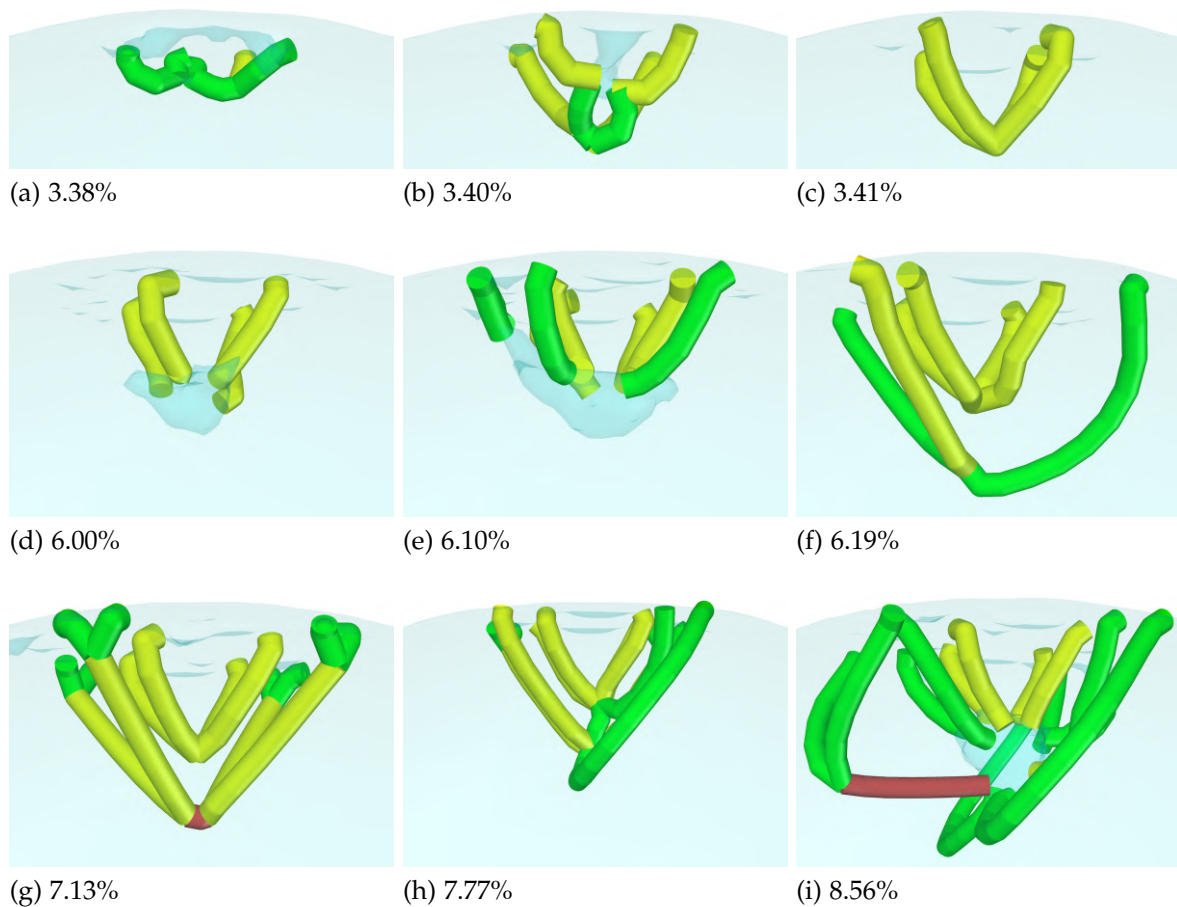


FIGURE 3.18 – Évolution des premiers événements plastiques dans une nano-sphère de 18.8nm de taille selon l'orientation [001] à 300K (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, marron : dislocations sessile de type $1/3 \langle 110 \rangle$).

niveau est moins importante que celle habituellement constatée dans les nano-sphères de structure CFC [Salah et al., 2017, Bian and Wang, 2013]. Des compressions supplémentaires entraînent le glissement des dislocations partielles vers le centre de la nanoparticule. Pour les nanoparticules de 9.97nm, en accord avec la littérature, une seule pyramide se forme [Salah et al., 2017, Bian and Wang, 2013]. Pour celles de 25.90nm, des mécanismes similaires à ceux observés avec les nanoparticules de 18.8nm ont été obtenus.

Les premiers événements plastiques observés avec les nano-sphères étudiées s'approchent plus du comportement des nano-cubes arrondis que ceux des nano-cubes. En effet avec les nano-cubes arrondis, à partir d'un certain coefficient d'arrondissement, il se forme une pyramide [Amodeo and Lizoul, 2017] similaire à celle observée dans ces nano-sphères alors que pour les nano-cubes, même si le comportement débute avec de la génération de dislocation partielles de Shockley, du fait de sa géométrie, aucune pyramide ne se forme quelle que soit la taille lors des premiers événements plastiques.

Pour des taux de compression plus élevés, les dislocations se dirigent vers le centre de la

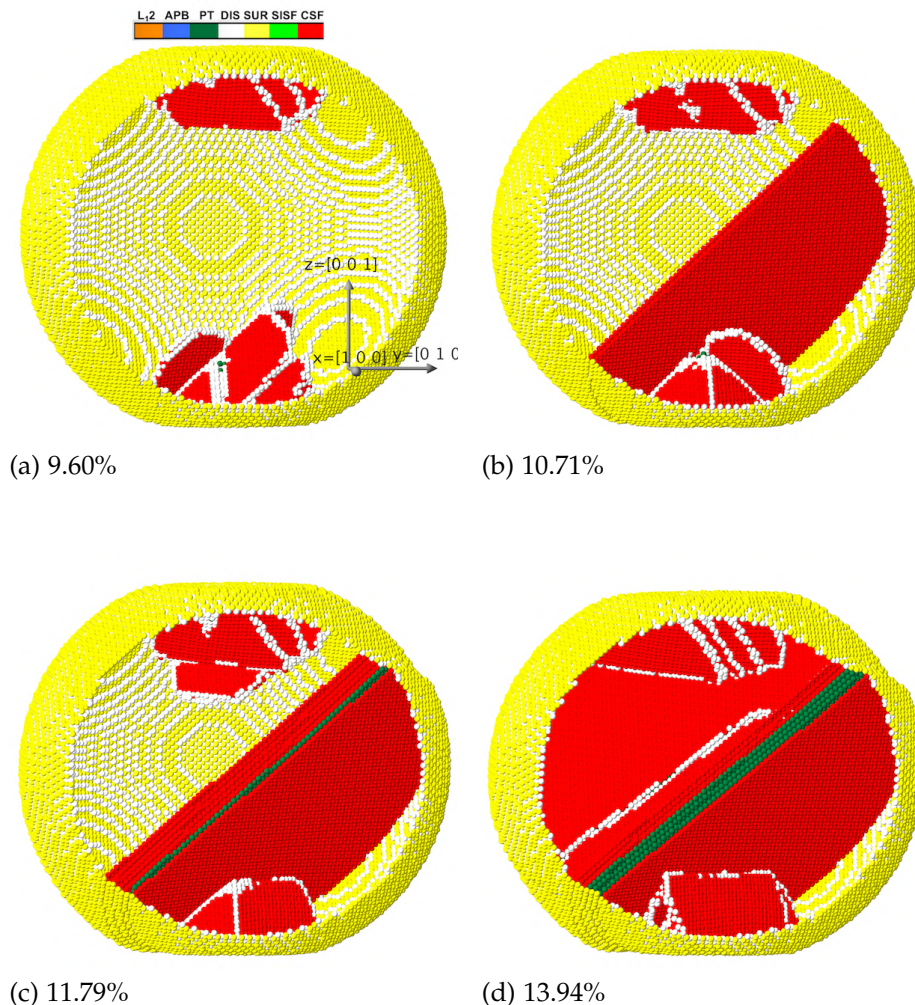


FIGURE 3.19 – Évolution du mécanisme de plasticité, pour des taux de compression compris entre 9.60% et 13.94%, dans une nano-sphère de 18.8nm, selon l'orientation [001], à 5K.

NP vont laisser derrière elles des défauts d'empilement complexes (CFSs) (Figure 3.19a). Ces derniers interagissent avec d'autres dislocations qui en augmentant la compression se glissent dans leurs plans adjacents pour former des pseudo-macles (PTs) dont la quantité augmente au fur et à mesure que le taux de compression augmente.

La quantité de SISF formée au cours de la déformation est très faible, comme dans les nano-cubes et nano-cubes arrondis. La quantité d'APB observée reste très inférieure à celle observée dans ces derniers.

Du fait de la différence de structure, les types de défauts qui se forment dans les nano-sphères de Ni_3Al de structure $L1_2$ sont différents de ceux habituellement observés dans les nano-sphères de structures CFC (Al , Cu , Ni ...).

Les calculs présentés dans cette partie sont effectués à la fois à faible température (5K) et à

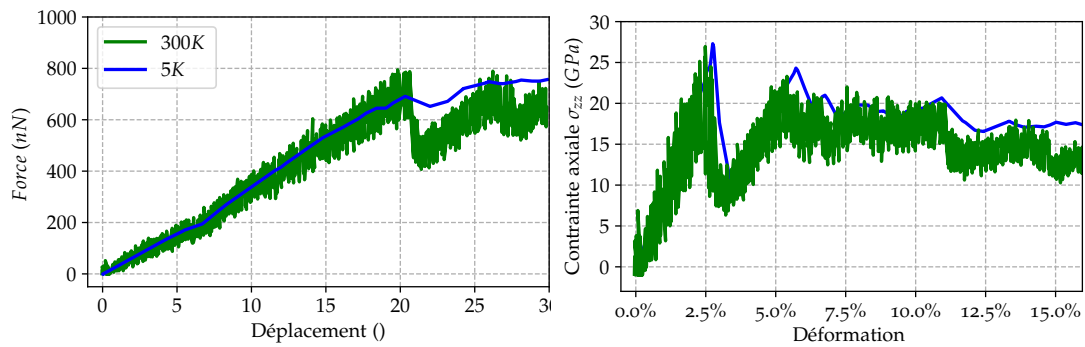


FIGURE 3.20 – Évolution du comportement mécanique pour une nano-sphère de 18.8nm, à 5K et à 300K, suivant l'orientation [001].

température ambiante (300K). Les courbes de chargement (Figure 3.20) obtenues montrent que, lors des premiers stades de déformation, les comportements obtenus sont similaires. Cependant, vis à vis des mécanismes de plasticité, certains types de défauts formés à 300K (*APB* et *SISF*) (Figure 3.21) ne sont pas observés à 5K.

Ceci montre que même s'il est coutumier d'effectuer des calculs à faibles températures pour éviter le bruit observé à des températures supérieures ou égales à la température ambiante, des vérifications doivent toujours être faites (surtout sur le mécanisme de plasticité) afin d'évaluer si les résultats obtenus sont représentatifs des comportements observés à des températures plus élevées.

L'étude du comportement mécanique des nanoparticules de Ni_3Al à température ambiante a permis de comprendre l'influence de la forme, de la taille et de l'orientation cristallographique sur les mécanismes de plasticité (mode de déformation, types défauts ...). Néanmoins, en prenant en compte leur domaine d'application, il s'avère que ces précipités sont présents dans des matériaux tels que les superalliages qui sont le plus souvent sollicités à hautes températures. Comprendre le comportement de ces précipités à hautes températures apparaît opportun pour mieux connaître et/ou maîtriser le comportement des dits matériaux dans lesquels ils sont contenus.

DESCRIPTION DU COMPORTEMENT MÉCANIQUE À HAUTE TEMPÉRATURE

Les précipités Ni_3Al sont connus pour leur rôle important dans la tenue mécanique des superalliages et surtout à hautes températures. Dans le cadre de cette étude, trois formes de nano-précipités sont envisagés : cubiques, cubiques arrondis et sphériques, lesquelles sont

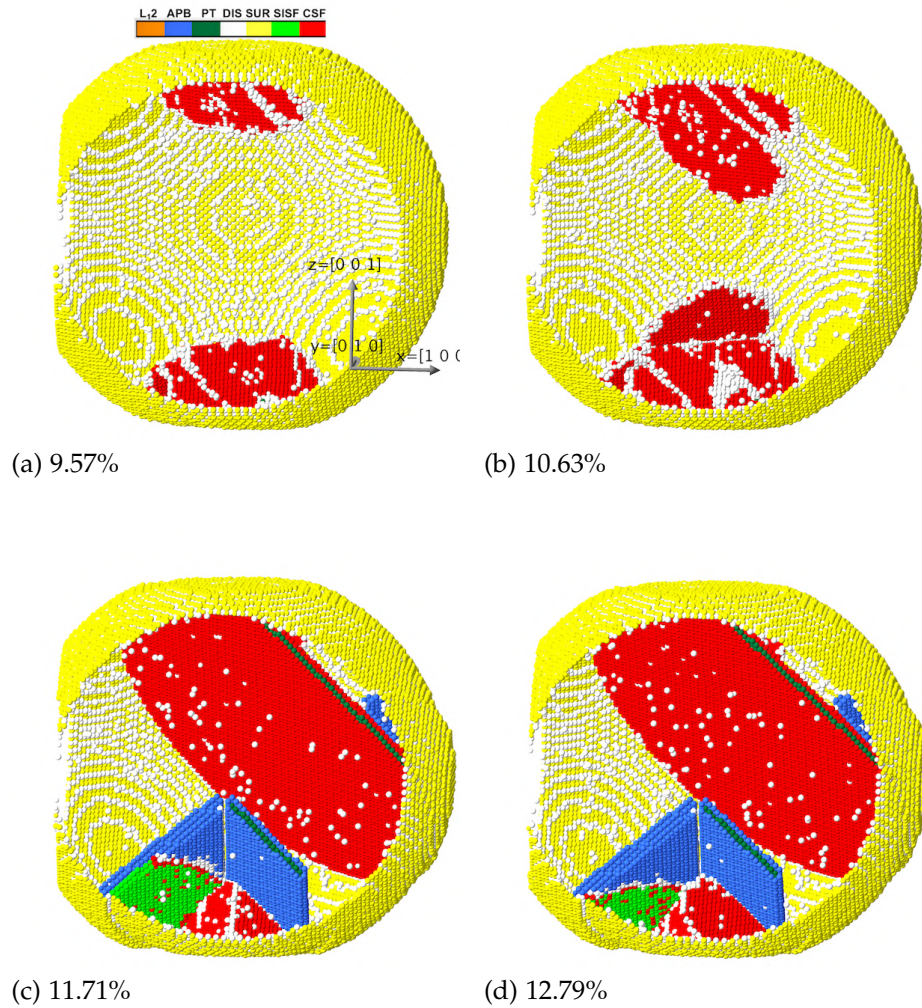


FIGURE 3.21 – Évolution du mécanisme de plasticité pour des taux de compression compris entre 9.57% et 12.79%, dans une nano-sphère de 18.8nm, selon l'orientation $[001]$, à 300K.

sollicitées selon l'orientation cristallographique $[001]$. La même thermalisation est effectuée pour chaque système, dans les mêmes conditions, afin de les amener aux températures respectivement de 300K, 500K, 700K et 1073K, auxquelles les nano-précités sont comprimés avec une vitesse de déformation de $10^8 s^{-1}$ en utilisant l'IFF.

L'estimation des surfaces de contact est effectuée avec la méthode de triangulation de Delaunay, puisque celle de Vergeles n'est pas adaptée pour les géométries cubiques et cubiques arrondies (voir section 2 du chapitre 2).

L'un des problèmes majeurs dans l'étude du comportement mécanique des nanoparticules isolées à haute température en dynamique moléculaire est la présence du bruit issu de l'agitation des atomes. En effet, l'agitation des atomes fait varier la distance entre leurs positions et les positions des plaques virtuelles. Par conséquent, il apparaît une variation de la force appliquée puisque cette dernière est proportionnelle au carré de la distance entre

les positions atomiques et celles des plaques virtuelles. Sur les courbes de chargement, ce bruit se manifeste par des oscillations de faible amplitude. Pour le limiter, il a été appliqué le filtre de Savitzky et Golay utilisé en traitement de signal [Savitzky and Golay, 1964]. Ce filtre permet de lisser des données sur chaque fenêtre de largeur N choisie à l'aide d'un polynôme de degré d inférieur à N .

Pour minimiser l'erreur au sens des moindres carrés sur le polynôme choisi, une régression est effectuée.

Ce filtre permet de reproduire de manière fidèle les variations d'amplitudes importantes présentes sur les courbes initiales non filtrées.

Dans cette section, seuls les mécanismes de plasticité obtenus à 700K seront présentés pour plus de clarté. Le lecteur est renvoyé à la section C de l'annexe pour plus de détails sur les mécanismes de plasticité à hautes températures.

Cubes : comportement mécanique et mécanisme de plasticité

Les courbes de chargement force-déplacement pour un cube de $15nm$ à des températures de 300K, 500K, 700K et 1073K sont présentées à la Figure 3.22. Les comportements obtenus après l'application du filtre sont aussi présentés sur ces mêmes graphes. À toutes les températures, les courbes obtenues après le filtre reproduisent de manière satisfaisante les variations moyennes observées sur les courbes initiales non filtrées.

Sur ces courbes, il apparaît (Figure 3.23) que le module et la limite d'élasticité du nanocube diminuent avec l'augmentation de la température.

L'évolution du comportement reste similaire pour toutes les températures. Mais au début du chargement, à une température de 1073K, il est observé une déviation du comportement du fait de la dilatation thermique avant de reprendre une évolution similaire à celles observées pour les autres températures.

En ce qui concerne l'évolution des surfaces de contact (Figure 3.23), pour toutes les températures, elles augmentent graduellement avec le chargement. Ceci est dû au fait que, lors du chargement, les atomes en contact avec le champ de force s'écartent de leur position, entraînant une augmentation de la surface des triangles et donc de la surface de contact. Cependant, aucun saut important similaire à ceux retrouvés dans les nano-sphères n'est observé. Toutefois, une faible augmentation de la surface en fonction de la température est à noter.

Avec l'augmentation de la température, des mécanismes similaires à ceux observés à température ambiante sont observés. L'évolution des mécanismes activés pour une tempéra-

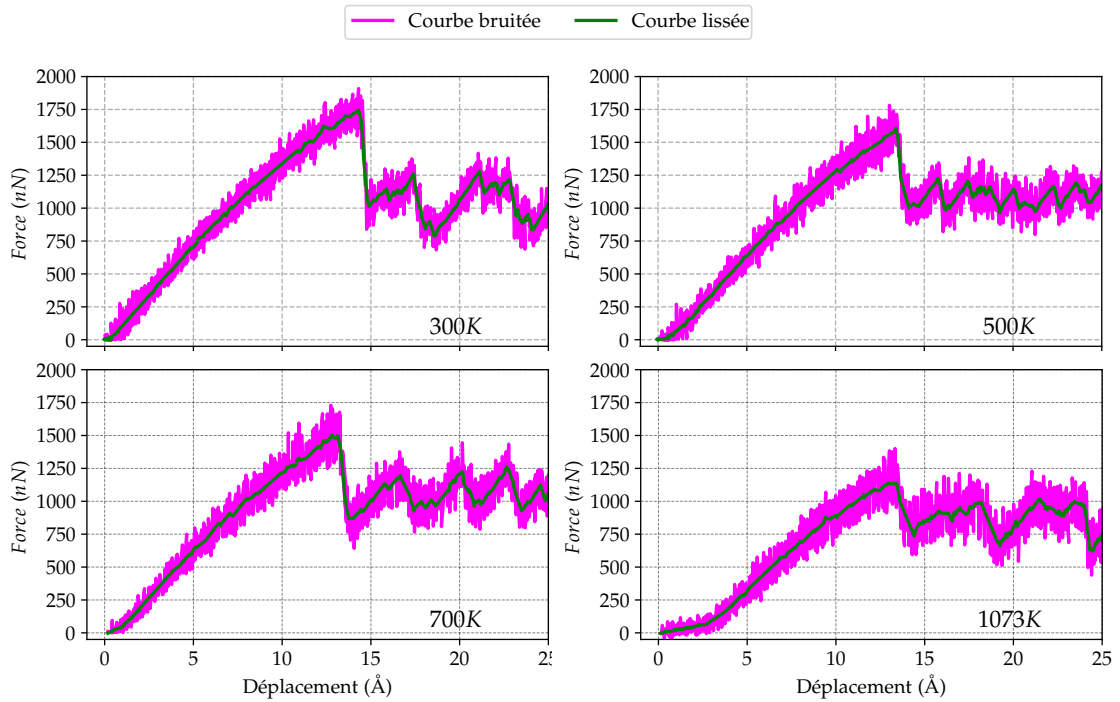


FIGURE 3.22 – Variation de la force appliquée sur un nano-cube de 15nm en fonction du déplacement, avant et après application du filtre de [Savitzky and Golay, 1964], pour des températures de 300K, 500K, 700K et 1073K.

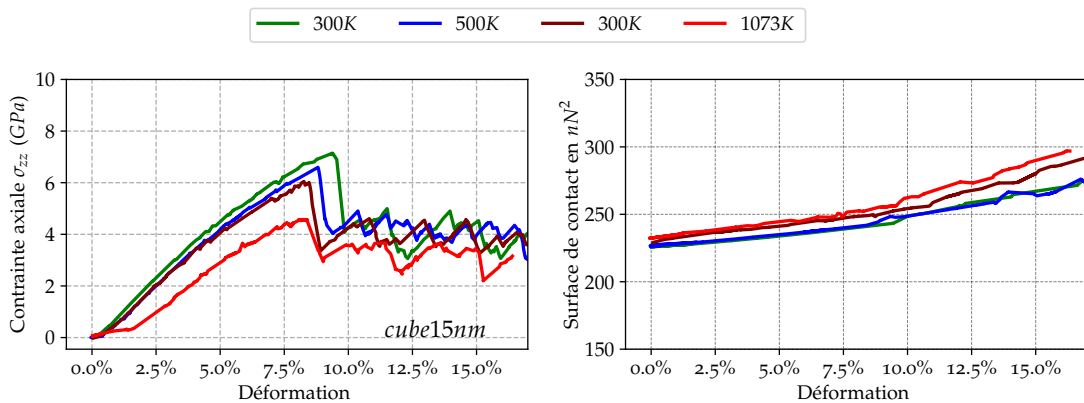


FIGURE 3.23 – Évolution du comportement mécanique et de la surface de contact d'un nano-cube de 15nm à 300K, 500K, 700K et 1073K suivant l'orientation [001].

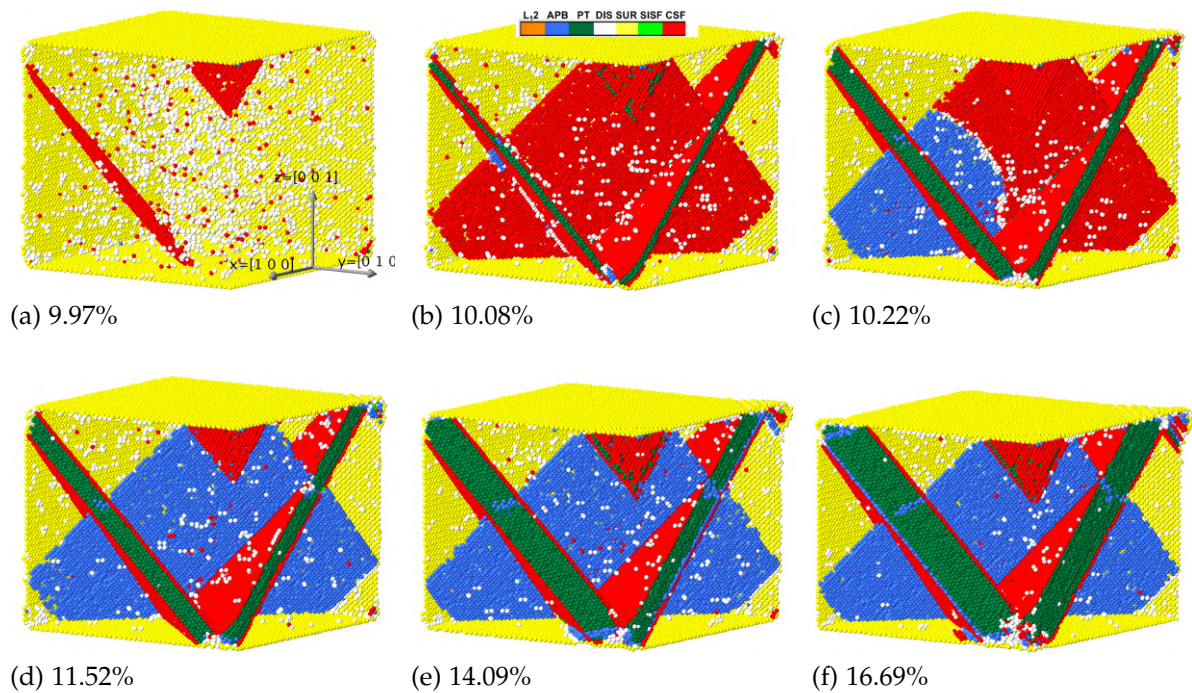


FIGURE 3.24 – Évolution du mécanisme de plasticité d'un nano-cube de 15nm à 700K comprimé suivant l'orientation [001].

ture de 700K est indiquée à la Figure 3.24.

La plasticité commence avec la nucléation de dislocations au niveau des coins qui vont glisser rapidement vers le centre de la nanoparticule en laissant derrière elles des CSFs (Figure 3.24a). Si on augmente le chargement, d'autres dislocations, glissant dans les plans adjacents aux plans dans lesquels se forment les CSFs, sont générées. Ces dernières laissent à leur tour des CSFs, lesquels évoluent avec les CSFs préexistant, pour former des pseudo-macles (PTs) (Figure 3.24b).

À un taux de chargement de 10.22%, il est observé la formation d'APB, suite au glissement de dislocations partielles de Shockley dans les mêmes plans où résident les CSFs (Figure 3.24c).

Des compressions supplémentaires entraînent une augmentation de la quantité d'APB et de PT (Figure 3.24d, 3.24e et 3.24f).

Les évolutions des quantités de défauts en fonction de la déformation pour les températures de 300K, 500K, 700K et 1073K sont présentées sur la Figure 3.25. L'analyse des courbes montre que pour toutes les températures, les types de défauts qui se forment majoritairement sont les PTs suivis des CSFs et des APBs. La quantité de SISF formée pour toutes les températures reste très faible devant celle des autres types de défauts.

Au début du chargement, il est constaté une quantité de CSF plus élevée à cause du mouvement des dislocations partielles de Shockley laissant derrière elles ces CSFs. Pour

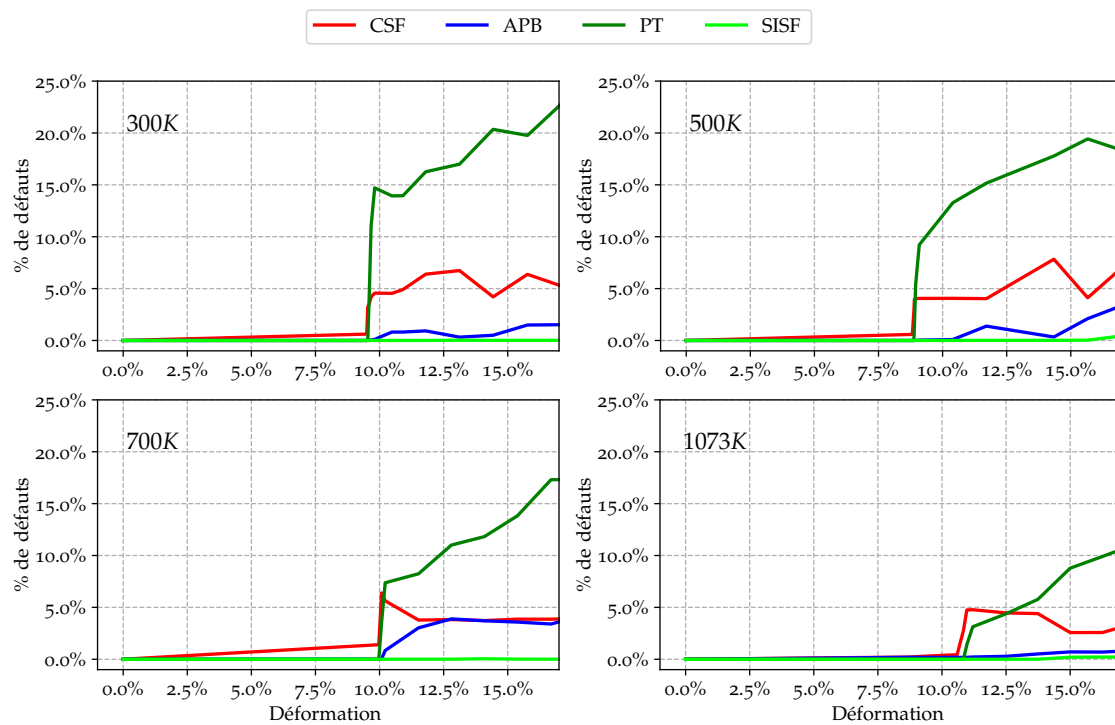


FIGURE 3.25 – Évolution des quantités et types de défauts dans un nano-cube de 15nm à 300K, 500K, 700K et 1073K pendant la compression suivant l'orientation [001].

des taux de compression plus élevés, le glissement d'autres dislocations dans les plans adjacents aux plans de formations des CSFs entraînent la formation et l'augmentation des quantités de PT et d' APB .

Néanmoins la quantité de PT formée diminue avec l'augmentation de la température.

Cubes arrondis : comportement mécanique et mécanisme de plasticité

L'étude du comportement mécanique des nano-cubes arrondis montre des évolutions similaires quelle que soit la température. De manière similaire aux nano-cubes, l'augmentation de la température entraîne une diminution du module et de la limite d'élasticité (Figure 3.26). Au tout début de la compression, il apparaît un effet de ramollissement dû à la dilation thermique. En revanche, le saut observé dans l'évolution des surfaces de contact est nettement plus visible (Figure 3.26). Aussi avec les nano-cubes arrondis, une diminution de l'amplitude des chutes avec des températures supérieures à 300K est visible. Ceci peut être causé par le fait qu'il s'amorce un changement du mode de déformation homogène vers un mode de déformation hétérogène pour des températures supérieures à 300K. Les mécanismes de plasticité obtenus pour des températures supérieures ou égales à 500K avec les nano-cubes arrondis sont tous hétérogènes et similaires aux modes de déformation observés à température ambiante. Comme observé dans l'étude du comportement

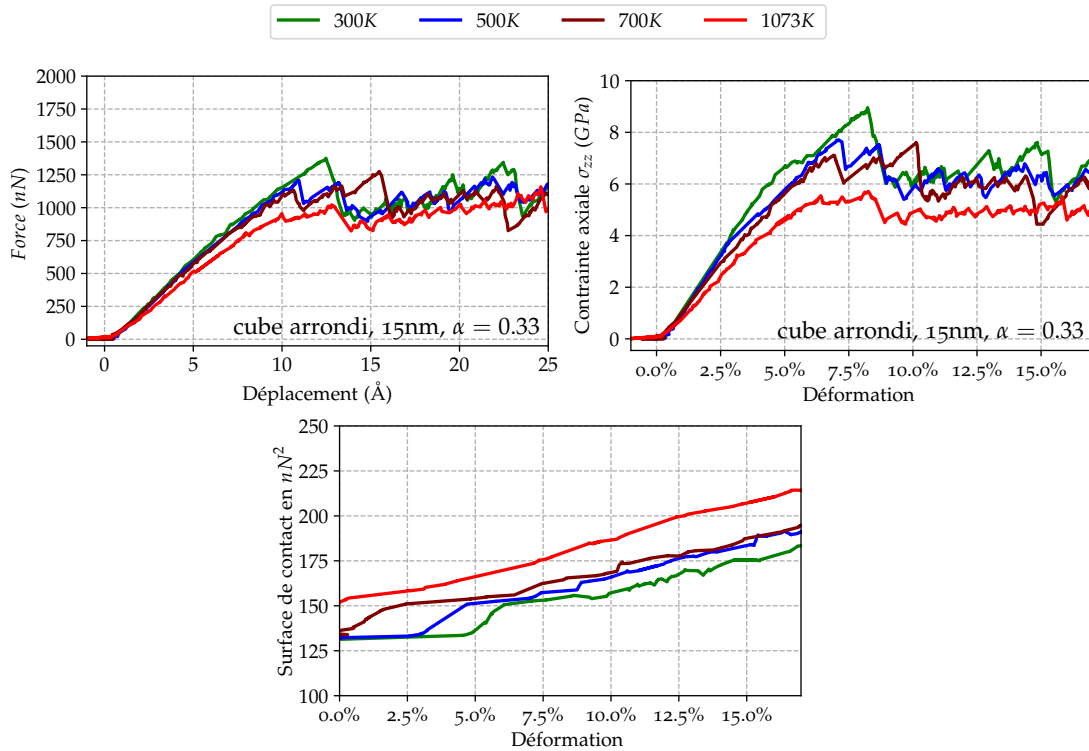


FIGURE 3.26 – Évolution du comportement mécanique (force-déplacement et contrainte déformation), et de la surface de contact d'un nano-cube arrondi de 15nm à 300K, 500K, 700K et 1073K suivant l'orientation [001].

mécanique des nano-cubes arrondis à des températures allant de 5K à 300K (Figure 3.9), la concentration de contrainte visible au centre de la nanoparticule (pour certaines tailles et coefficients d'arrondissement à 300K) disparaît complètement pour des températures supérieures ou égales à 500K, et ceci quelle que soit la taille et quel que soit le coefficient d'arrondissement.

Le mécanisme de plasticité se déployant à une température de 700K (Figure 3.27) commence avec la nucléation de dislocations partielles de Shockley à partir de la surface de contact, près des coins (Figure 3.27a). Avec l'arrondissement des cubes, les sites de nucléation se rapprochent, favorisant ainsi une interaction plus facile des dislocations qui glissent en laissant derrière elles des CSFs (Figure 3.27b et 3.27c).

Pour des taux supérieurs de compression, d'autres dislocations vont glisser dans les plans adjacents aux plans de résidence des CSFs, et ainsi favoriser la formation d'autres joints de CSFs, lesquels évoluent ensuite pour donner des PTs (Figure 3.27d).

Concernant les types de défauts qui se forment en fonction de la déformation à différentes températures, il est constaté des quantités de PT et de CSF plus importantes comparées aux quantités d'APB et de SISF (Figure 3.27e et 3.27f). Sauf à une température de 500K pour laquelle, les quantités d'APB, de CSF et PT sont proches (Figure 3.28). Les quantités

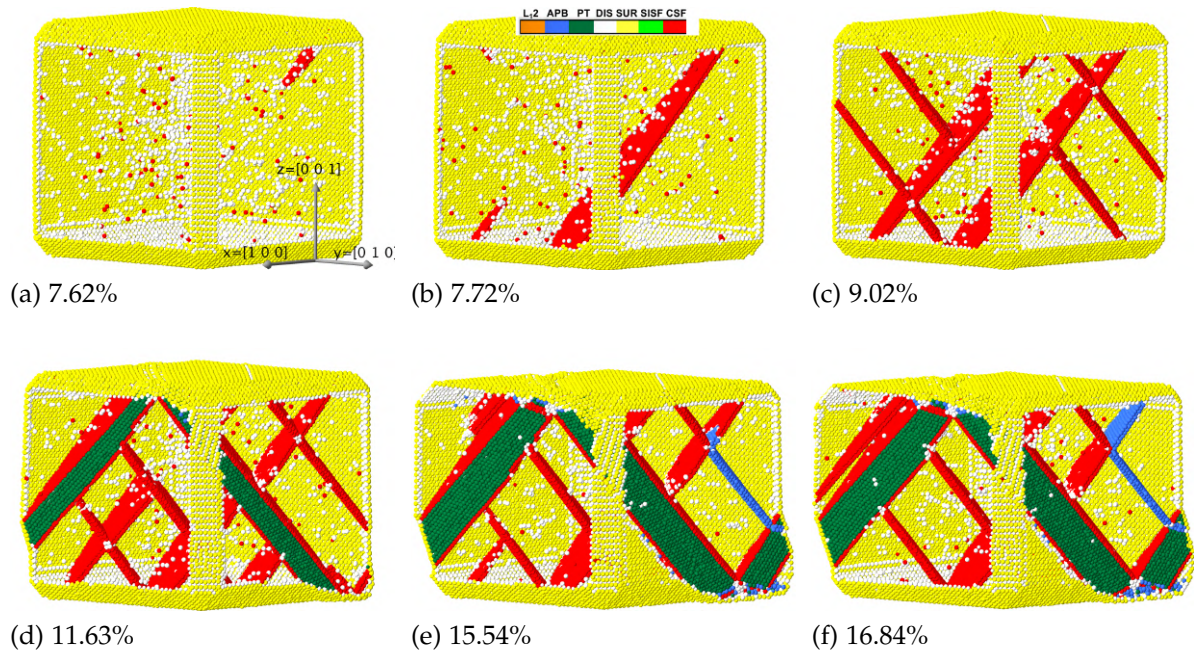


FIGURE 3.27 – Évolution du mécanisme de plasticité d'un nano-cube arrondi de 15nm à 700K comprimé suivant l'orientation [001].

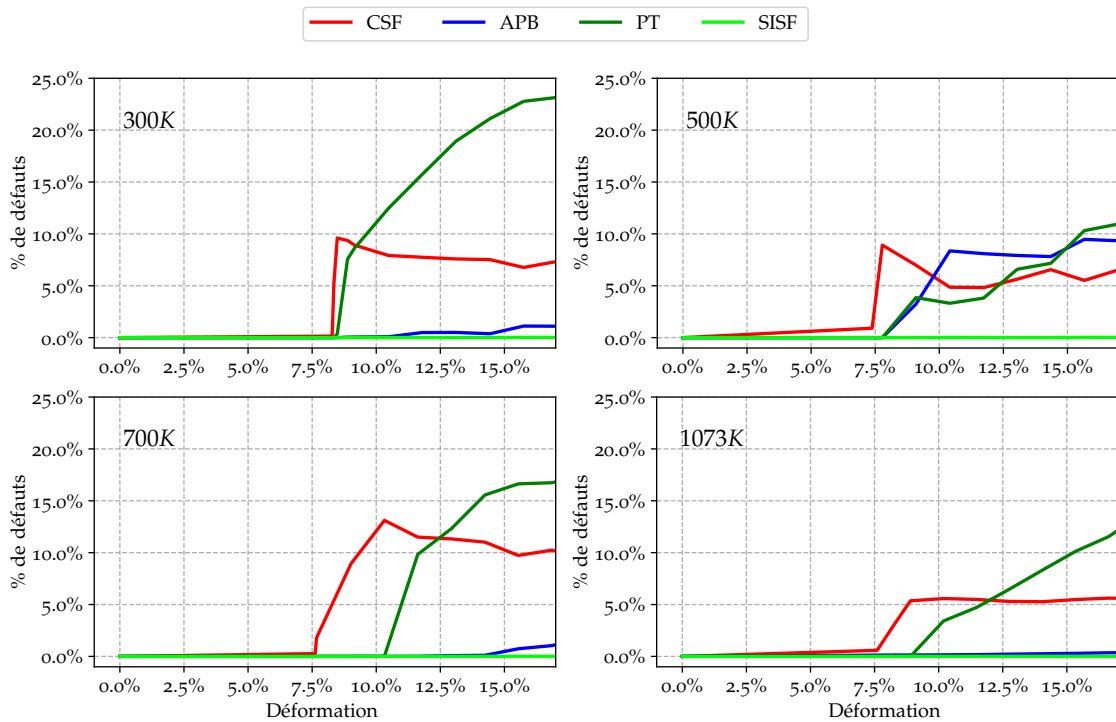


FIGURE 3.28 – Évolution des quantités et types de défauts dans un nano-cube arrondi de 15nm à 300K, 500K, 700K et 1073K pendant la compression suivant l'orientation [001].

de CSF et de PT restent toutefois supérieures aux quantités de $SISF$ formés pour toutes les températures.

Enfin, comparées aux nano-cubes, l'écart entre les quantités de CSF et de PT formées diminue dans le cas des nano-cubes arrondis, mis à part la tendance observée à 300K.

Sphère : comportement mécanique et mécanisme de plasticité

Concernant les nano-sphères, il est constaté des écarts moins marqués sur les courbes forces-déplacements comparées aux courbes contraintes-déformations (Figure 3.29). Quant

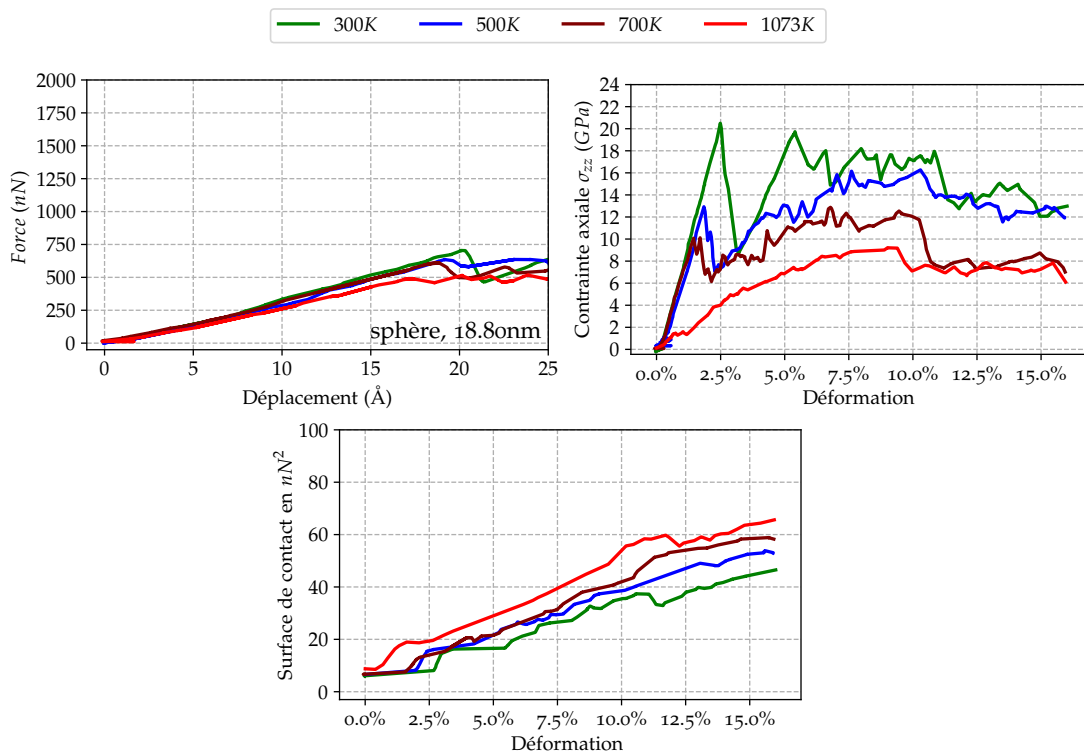


FIGURE 3.29 – Évolution du comportement mécanique (force-déplacement et contrainte déformation), et de la surface de contact d'une nano-sphère de 18.8nm à 300K, 500K, 700K et 1073K suivant l'orientation [001].

à l'évolution de la surface de contact, elle augmente en fonction de la température, comme observé sur les nano-cubes et les nano-cubes arrondis. Cependant, avec ces derniers, les variations de leur surface de contact, pendant leur déformation sont moins importantes que celles constatées avec les nano-sphères (Figure 3.29) et ceci, pour toutes les températures. Ce résultat peut être attribuer à l'effet de la géométrie de surface qui devient plus important lorsque la nanoparticule est sphérique. Avec l'augmentation de la température, les phénomènes de ramollissement font qu'il sera plus facile de déplacer les atomes des premières couches vers les secondes couches (Figure 3.16). C'est la raison pour laquelle,

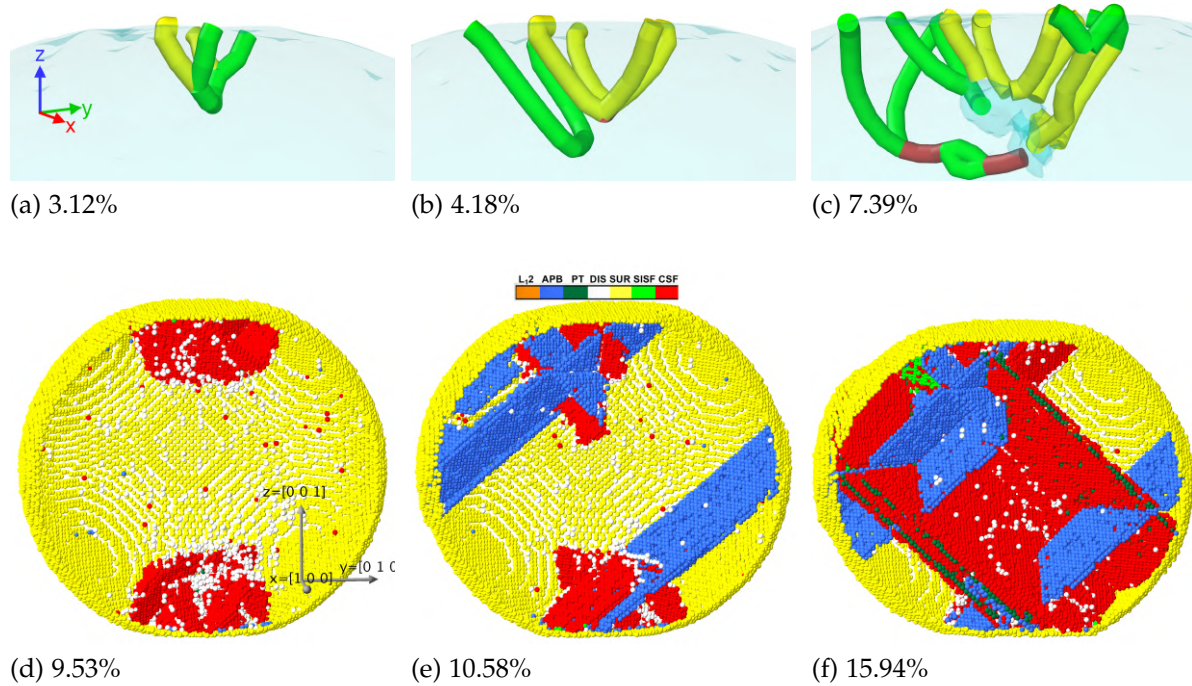


FIGURE 3.30 – Évolution du mécanisme de plasticité d'une nano-sphère de 18.8nm à 700K comprimé suivant l'orientation [001]. (a, b et c)–(verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, marron : dislocations sessiles de type $1/3 \langle 110 \rangle$).

le niveau de déformation auquel apparaît le premier saut sur la courbe d'évolution des surfaces, marquant les premiers événements plastiques, diminue avec l'augmentation de la température. Par conséquent, le niveau de chargement requis pour atteindre la limite d'élasticité diminue aussi avec l'augmentation de la température.

Le mécanisme de plasticité observé à des températures supérieures à 300K se rapproche un peu de celui observé à température ambiante avec toutefois quelques différences. Le résumé du mécanisme de plasticité à 700K pour une nano-sphère de 18.8nm est indiqué à la Figure 3.30. Le début du mécanisme est marqué par la nucléation de dislocations partielles de Shockley qui vont se rencontrer pour former une première pyramide similaire à celle qui est observée à 300K (Figure 3.30a et 3.30b). Pour des taux de compression supérieurs, il est à noter la nucléation d'autres dislocations partielles de Shockley, qui vont s'intercepter, formant cette fois soit des dislocations de type $1/3 \langle 100 \rangle$ (qui sont de même type que celles qui forment la première pyramide), soit des dislocations de type $1/3 \langle 110 \rangle$ (Figure 3.30c). Ceci empêche alors la formation de la seconde pyramide et ceci diffère du mécanisme observé à température ambiante dans lequel ils se forment deux pyramides imbriquées.

Si la compression augmente, les dislocations se détachent et glissent vers les faces opposées de la nanoparticule en laissant derrière elles des CSFs qui sont transformés en

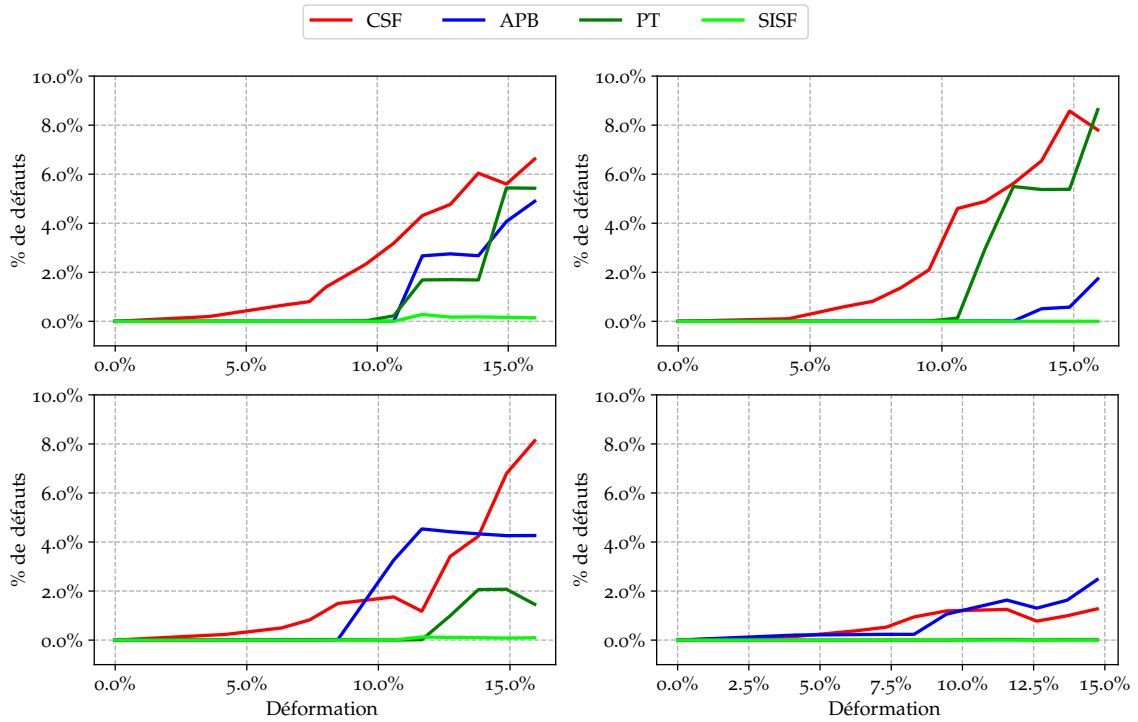


FIGURE 3.31 – Évolution des quantités et types de défauts dans une nano-sphère de 18.8nm de taille à 300K, 500K, 700K et 1073K pendant la compression suivant l'orientation [001].

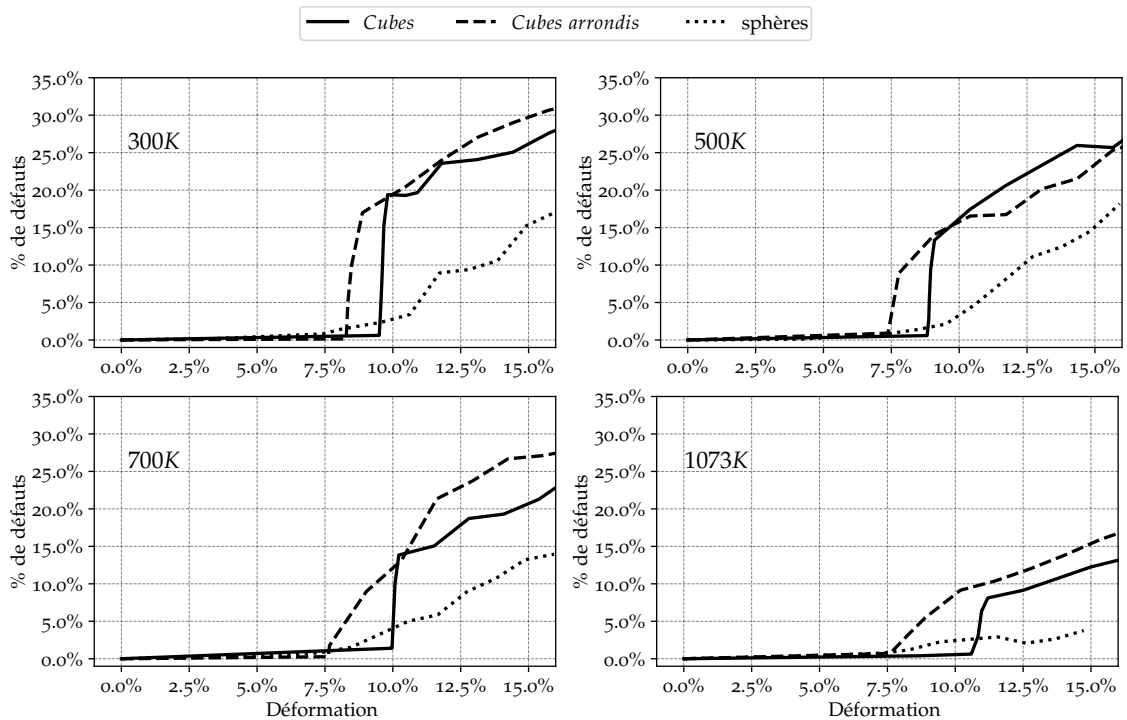


FIGURE 3.32 – Évolution des quantités totales de défauts à 300K, 500K, 700K et 1073K en fonction de la forme pendant la compression suivant l'orientation [001].

APB par d'autres dislocations glissant dans leurs plans de formation (Figure 3.30d et 3.30e). Pour des taux de compressions plus élevés, la nucléation et le glissement d'autres dislocations laissent derrière elles des *CSFs* très étendus qui évoluent pour former des *PTs* (Figure 3.30f).

L'analyse des courbes de la Figure 3.31 montre que les quantités de *PT*, de *CSF* et d'*APB* formées pendant la compression demeurent plus importantes que les quantités de *SISF* formées pour toutes les températures. Mais contrairement aux tendances observées sur les nano-cubes et nano-cubes arrondis, la quantité d'*APB* formée est non négligeable devant les quantités de *PT* et de *CSF*, sauf à une température de 500K.

De plus, comparée aux nano-cubes et nano-cubes arrondis, la quantité de *CSF* est plus importante que celle de *PT*. D'où une inversion de la tendance observée dans les nano-cubes et nano-cubes arrondis.

L'observation de la variation des quantités de défauts en fonction de la forme et de la température amène à considérer l'évolution des quantités de défauts totaux selon ces deux facteurs (forme et température).

Les courbes de la Figure 3.32 montrent l'évolution des quantités de défauts totaux en fonction de la forme pour des températures de 300K, 500K, 700K et 1073K.

Pour toutes les températures, si les quantités de défauts formés dans les nano-cubes et nano-cubes arrondis sont proches, ces derniers restent supérieurs aux quantités de défauts formés dans les nano-sphères.

Aussi on peut voir que quelle que soit la forme, les quantités de défauts totaux diminuent de manière globale avec l'augmentation de la température.

L'effet de la forme est considéré comme un facteur déterminant dans les études récentes visant à décrire le comportement mécanique des nanoparticules, surtout dans les étapes d'initiation des mécanismes de plasticité. Cependant, ces études sont souvent effectuées à des températures faibles (inférieures à la température ambiante).

Les résultats présentés dans cette partie ont permis d'étudier les modes de déformation privilégiés à des températures supérieures à la température ambiante (300K). Mais aussi de voir l'influence de la forme, couplé à l'effet de la température, sur les variations des comportements et surtout sur les types de défauts susceptibles de se former.

CONCLUSION DU CHAPITRE

Par rapport à la littérature

Dans ce chapitre, il a été conduit une étude du comportement mécanique des nanoparticules isolées de Ni_3Al , à la fois à température ambiante et à hautes températures. Les questions d'effet de taille, de forme et d'orientation cristallographique sur le comportement mécanique, ainsi que sur les modes de déformation, ont été abordées.

Les résultats issus des études effectuées à température ambiante, sur les effets de forme et de taille, sur le comportement des nano-cubes et nano-cubes arrondis de Ni_3Al sont en bon accord avec les résultats issus de la bibliographie, malgré certaines remarques sur le mode de déformation à température ambiante. En effet, nos calculs ont montré l'existence d'une température de transition d'un mode déformation homogène vers un mode de déformation hétérogène à des températures inférieures à 300K pour certaines tailles avec certains coefficients d'arrondissement.

Ce qui est nouveau

Sur les nano-sphères de Ni_3Al , des modes de déformation similaires à ceux identifiés dans les matériaux de structure *CFC* (Al , Cu , ...) sont observés, mises à part quelques différences notables. Au début du mécanisme de plasticité, une coupure de la tête de la pyramide est observée lors de la nucléation des dislocations partielles qui s'interceptent pour former la seconde pyramide. Ce mécanisme de déformation trouvé dans les nano-sphères de Ni_3Al n'est pas constaté dans les nano-sphères de structure *CFC* (Al , Cu , ...). Pour des taux de compression plus élevés, du fait de sa structure ($L1_2$), la formation de certains défauts tels que les *APB* et les *SISF* apparaît, défauts qui ne peuvent pas se déployer dans les réseaux de structure *CFC*.

Les études menées sur l'impact de l'orientation de l'axe de sollicitation ont mis en évidence des différences tant sur le comportement que sur le mode de déformation plastique. Contrairement à l'orientation $[001]$ pour laquelle des modes de déformations homogènes peuvent être observés, seuls des modes de déformation hétérogènes se déploient dans les nano-cubes arrondis sollicités suivant les directions $[110]$ et $[111]$. Des différences sont aussi observées sur les types de défauts formés. En effet, si pour l'orientation $[001]$, les défauts de type *PT* et *CSF* se sont majoritairement formés, on note

plutôt la formation d'une majorité de *SISF* et d'*APB* pour les orientations de sollicitation [110] et [111].

Avec l'augmentation de la température, pour toutes les formes, il a été constaté une diminution du module et de la limite d'élasticité.

Sur les nano-cubes, des mécanismes de plasticités similaires à ceux obtenus à température ambiante sont observés.

Concernant les nano-cubes arrondis, aucun mode de déformation homogène n'est observé à partir d'une température de 500K, quels que soient la taille et le coefficient d'arrondissement, contrairement au comportement observé à température faible et/ou ambiante.

Sur les nano-sphères, pour des températures supérieures ou égales à 500K, il se forme une seule pyramide au lieu d'une double, comme cela a été observée à température ambiante.

Les quantités de défauts formés varient également avec la forme et la température. Une quantité plus importante de défauts est recensée dans les nano-cubes et nano-cubes arrondis comparés à la quantité de défauts formés dans les nano-sphères, et ce pour toutes les températures. Avec l'augmentation de cette dernière, pour toutes les formes, une diminution globale de la quantité totale de défauts formés est constatée.

Ce qu'il faut retenir

L'étude menée dans ce chapitre a permis de mieux comprendre le comportement mécanique d'une nanoparticule isolée de Ni_3Al aussi bien à température ambiante qu'à hautes températures. Pour ce qui suit, on retiendra que :

- Le comportement mécanique dépend de la forme et de l'orientation de l'axe de sollicitation ;
- le module et la limite d'élasticité diminuent avec l'augmentation de la température quelle que soit la forme ;
- le mode de déformation homogène ne s'opère qu'à des températures ambiantes et/ou faibles, et seulement suivant l'orientation [001] ;
- le mode de déformation hétérogène, qui est le seul mode de déformation observé à hautes températures, s'initie au niveau des surfaces de contact ;
- la quantité de défauts total diminue avec l'augmentation de la température quelle que soit la forme ;
- les *PTs* et/ou les *CSFs* sont les types de défauts qui se forme majoritairement dans les cubes et les cubes arrondis selon l'orientation [001] quelle que soit la température.

Concernant les nano-sphères, les types de défauts formés varient en fonction de la température.

COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES SYSTÈMES

$\gamma' / \gamma\text{-Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$

SOMMAIRE

MÉTHODOLOGIE	146
Minimisation et thermalisation	147
Évaluation du coefficient de dilatation $\alpha_{300K-1073K}$	152
Conditions aux limites et calcul de contraintes	154
COMPORTEMENT MÉCANIQUE À TEMPÉRATURE AMBIANTE (300K)	156
Comportement mécanique en traction et en compression : influence du sens de sollicitation	156
Mécanisme de plasticité au niveau de l'interface	157
Mécanisme de plasticité en compression	158
Mécanisme de plasticité en traction	160
COMPORTEMENT À HAUTES TEMPÉRATURES (500K, 700K ET 1073K)	162
Description du comportement mécanique	162
Description du mécanisme de plasticité	164
DISCUSSION	170
CONCLUSION	178
Résultats par rapport à la littérature	178
Ce qu'il faut retenir	179

=====

DANS ce chapitre, le comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$, sous la forme d'un précipité de Ni_3Al intégré dans une matrice de Ni est étudié. L'objectif est

ainsi de tenter d'expliquer, à l'aide de la technique de dynamique moléculaire, certains aspects du comportement mécanique ; notamment l'asymétrie en traction/compression, de superalliages base nickel tels que le PWA1480 ou l'IN100. Pour cela, des simulations de tests de traction et de compression sont réalisées sur des microstructures simples de types $\gamma' / \gamma\text{-Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$, ceci à différentes températures.

MÉTHODOLOGIE

Cette première section a pour but d'expliquer la méthodologie utilisée pour obtenir les microstructures étudiées. Par souci de concision, seule la présentation de la méthodologie relative aux microstructures contenant des renforts de forme cubique et occupant une fraction volumique d'environ 50% est abordée. La même méthodologie est employée sur les microstructures contenant des renforts de formes et/ou occupant des fractions volumiques différentes. Les systèmes $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}-\gamma'/\gamma$ sur lesquels portent nos études ont été mis en place en générant, à l'aide de scripts python, des positions selon des structures ordonnées $L1_2$ et CFC , respectivement pour la phase $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ et $\gamma\text{-Ni}$, dans deux régions différentes, suivant la même orientation cristallographique $\langle 001 \rangle$. Cette orientation cristallographique a été choisie car même si le module d'élasticité est moins important dans cette direction, elle reste celle qui permet d'avoir le meilleur équilibre entre les caractéristiques de traction, de fatigue et de fluage; et de ce fait, souvent privilégiée en terme d'application (pour les aubes par exemple). Les deux sous-systèmes sont ensuite assemblés pour former le système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}-\gamma'/\gamma$ (Figure 4.1). Des précipités de forme cubique

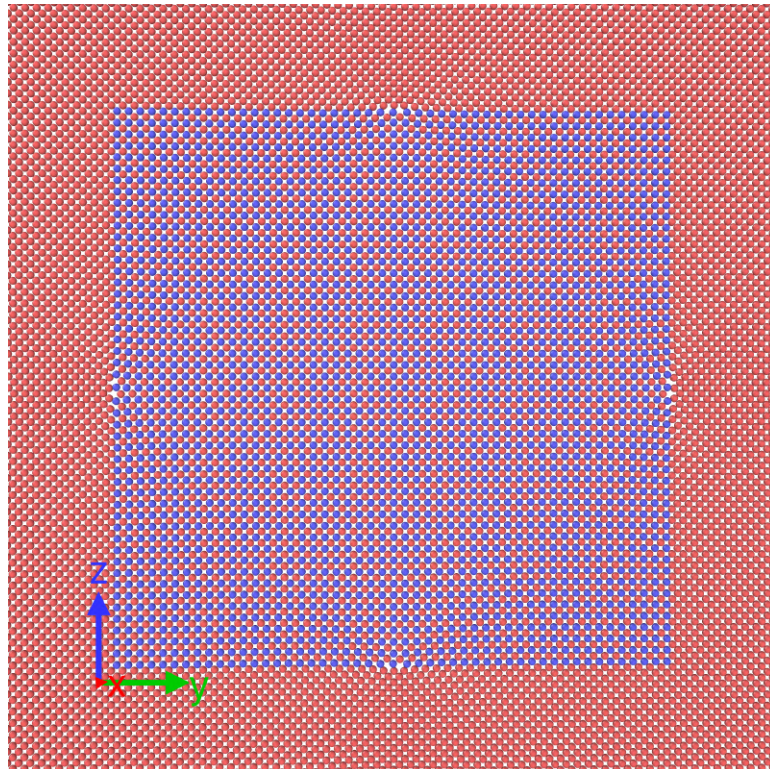


FIGURE 4.1 – Coupe transversale suivant le plan yz de la cellule initiale obtenue après l'étape de la minimisation. Le système est constitué de deux phases ($\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$) avec un précipité de forme cubique (atomes de Ni de couleur saumon et d'Al de couleur bleue).

et de forme cubique avec des coins arrondis occupant différentes fractions volumiques ont

été générés, afin d'étudier l'impact de la forme et de la fraction volumique sur le comportement mécanique (réf. chapitre 5). Les fractions volumiques ont été calculées en faisant le rapport entre le volume occupé par la phase $\gamma'(\text{Ni}_3\text{Al})$ et le volume total du système composé par les phases $\gamma'(\text{Ni}_3\text{Al})$ et $\gamma(\text{Ni})$. Sachant que les microstructures $\gamma' / \gamma\text{-Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$, se forment, lors des traitements thermiques, à des fractions atomiques précises, les fractions volumiques des phases $\gamma'(\text{Ni}_3\text{Al})$ ont été fixées à des valeurs qui permettent d'obtenir des pourcentages atomiques d'aluminium compris dans l'intervalle prédit par le diagramme d'équilibre binaire du système $\text{Ni} - \text{Al}$ (Figure 4.2), dans lequel on observe la formation de microstructure $\gamma' / \gamma\text{-Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$. Les fractions volumiques maximale et minimale fixées dans le cadre de notre étude sont environ respectivement de 62.90% et 37.90%, ce qui correspond environ à des fractions atomiques d'aluminium de 17% et 10% respectivement, indiquées par les lignes bleues sur la Figure 4.2. Le potentiel semi-empirique ici utilisé est le même qu'au chapitre précédent; et a été développé par [Du et al., 2012]. Ce potentiel est connu pour sa fiabilité à représenter les propriétés mécaniques de l'inter-métallique γ' [Amodeo and Lizoul, 2017, Shreiber and Mordehai, 2015] et du nickel qui constitue la phase γ [Du et al., 2012]. Il permet notamment de décrire les interactions entre les atomes dans les deux sous-systèmes γ' de structure $L1_2$ et γ de structure CFC .

Minimisation et thermalisation

Après génération de la microstructure, l'énergie de cette dernière est minimisée afin d'avoir un système représentatif du potentiel d'interaction qui a été développé en se basant sur des études expérimentales. Dans le cadre de cette étude, la relaxation a été effectuée à une tolérance d'énergie de 10^{-8} (variation d'énergie entre les itérations successives $\leq 10^{-8}$) en utilisant l'algorithme du gradient conjugué. Pendant cette étape de minimisation, les atomes vont occuper différentes positions permettant au système de tendre vers une configuration plus stable. Comme les paramètres de maille des phases γ et γ' ne sont pas les mêmes, l'interface entre ces deux phases évolue. D'après le potentiel utilisé dans le cadre de cette étude, les paramètres de maille des phases γ et γ' sont respectivement égales à 3.567 Å et 3.52 Å [Du et al., 2012]; ce qui correspond à l'existence d'un paramètre de désaccord (misfit parameter) δ défini par l'expression :

$$\delta = 2 * \frac{a_{\gamma'} - a_{\gamma}}{a_{\gamma'} + a_{\gamma}}, \quad (4.1)$$

où a_{γ} et $a_{\gamma'}$ représentent les paramètres de maille des phases $\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ respectivement. Ce paramètre de l'ordre de 1.2%, crée pendant la phase de relaxation une concen-

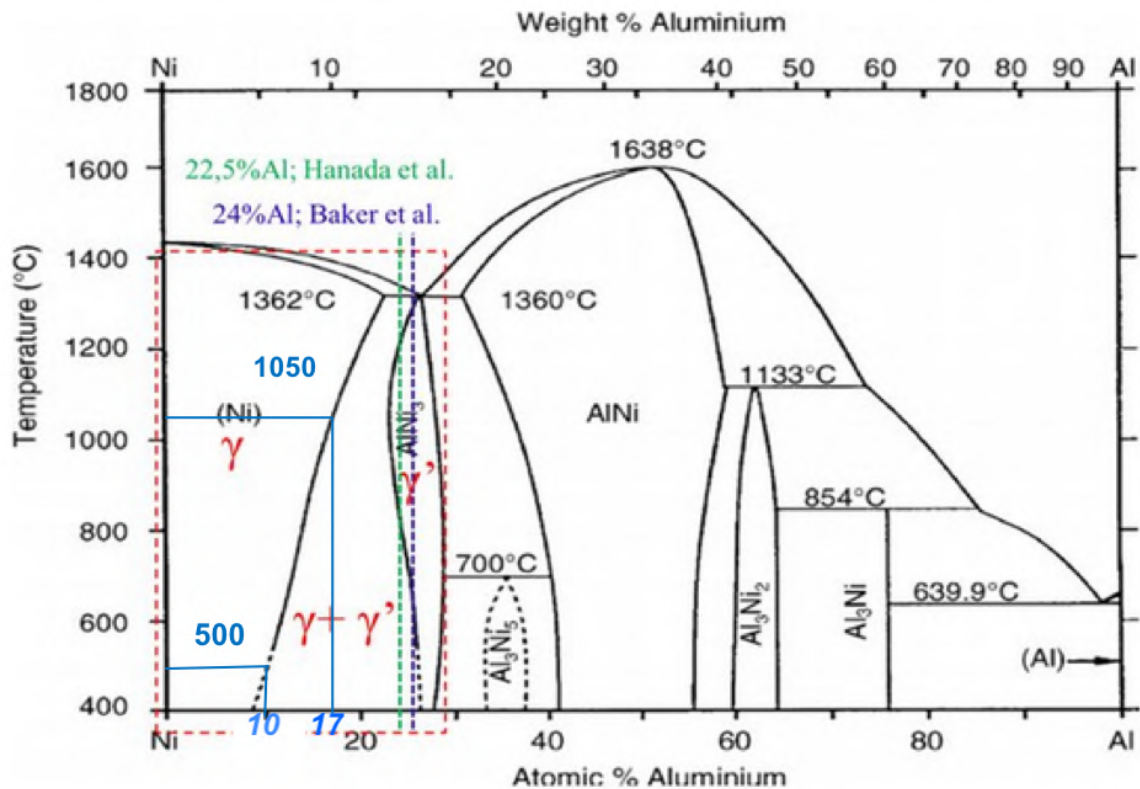


FIGURE 4.2 – Diagramme d'équilibre du système binaire Ni – Al. Les lignes bleues indiquent les deux températures limites correspondant aux fractions volumiques (plus petite et plus grande) fixées dans le cadre de cette étude.

tration de contrainte au niveau de l'interface. Cette concentration de contrainte peut se manifester au niveau de l'interface par une distorsion du réseau (Figure 4.1) et peut entraîner la génération de dislocations de misfit de types coins avec des vecteurs de Burgers de type $1/2 \langle 110 \rangle$ (Figure 4.3b). Les mêmes types de dislocations que celle observées dans nos simulations sont retrouvées dans les superalliages base nickel [Link et al., 2005]. Des simulations par éléments finis effectuées en 2D sur des microstructures de superalliages base nickel [Ganghoffer et al., 1991, Pollock and Argon, 1994] soutiennent que les amplitudes de contrainte de misfit au niveau de l'interface sont plus importantes au niveau des coins. Les simulations réalisées dans ce travail suggèrent plutôt des concentrations de contrainte résultant du désaccord paramétrique de maille, résident dans les endroits où se forment des dislocations de misfit (Figure 4.3d). Mais, comme ces dislocations de misfit passent au niveau des coins, l'observation d'une coupe transversale peut effectivement donner l'impression d'avoir les plus fortes concentrations de contraintes au niveau des coins (Figure 4.3c).

Une fois cette étape de relaxation effectuée, une thermalisation devra être réalisée pour

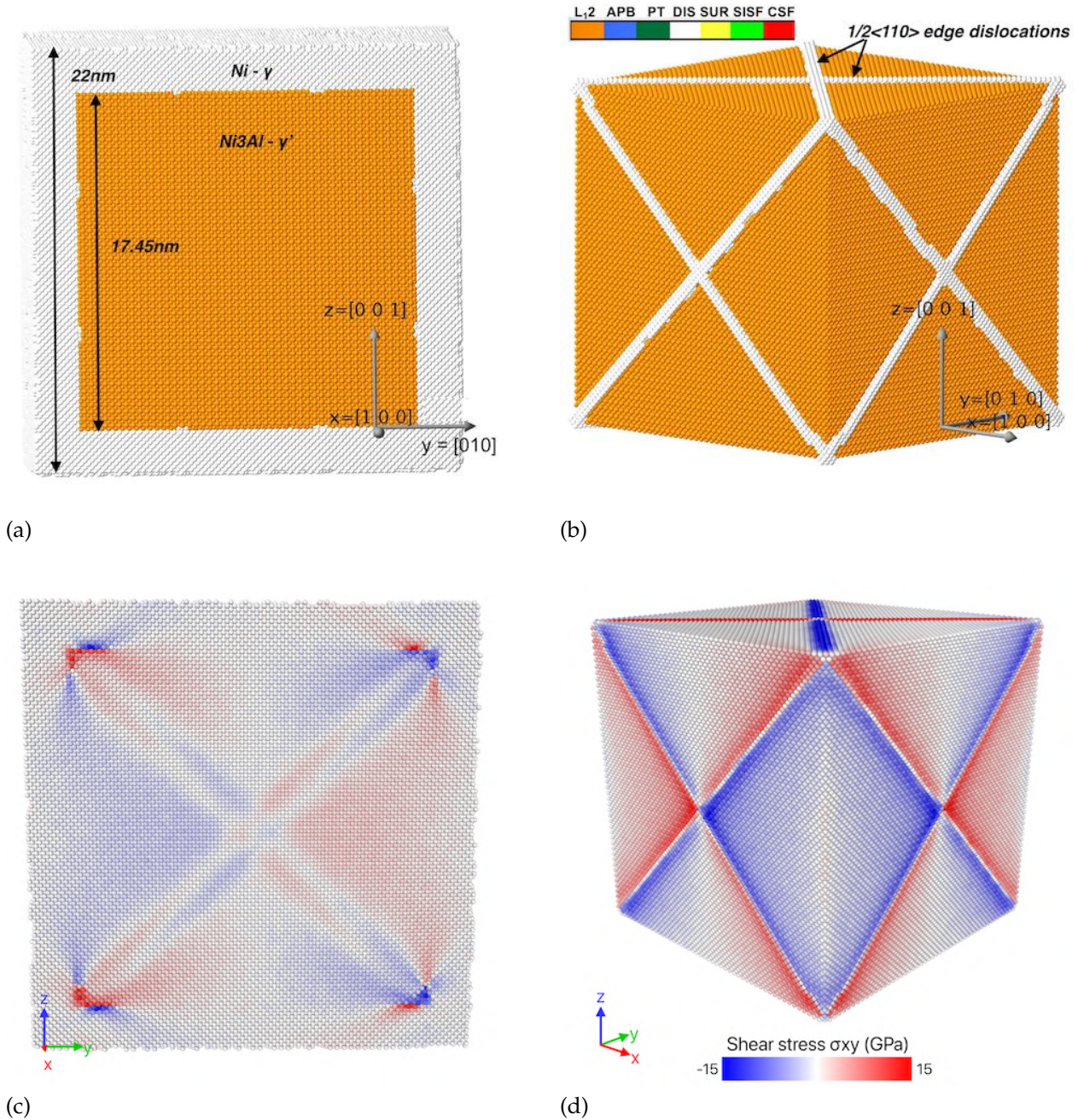


FIGURE 4.3 – Structure ($\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni} - \gamma'/\gamma$) obtenue après l'étape de minimisation. (a)-Coupe transversale suivant le plan (yz) pour mettre en évidence les différentes phases, (b)- Suppression de la phase $\gamma\text{-Ni}$ pour montrer les dislocations de misfit au niveau de l'interface, (c)-Coupe transversale suivant le plan (yz) et (d)-suppression de la phase $\gamma\text{-Ni}$ pour montrer la distribution de contrainte respectivement localisée dans les coins tel un système 2D et dans les endroits où se forment les dislocations de misfit dans un système 3D.

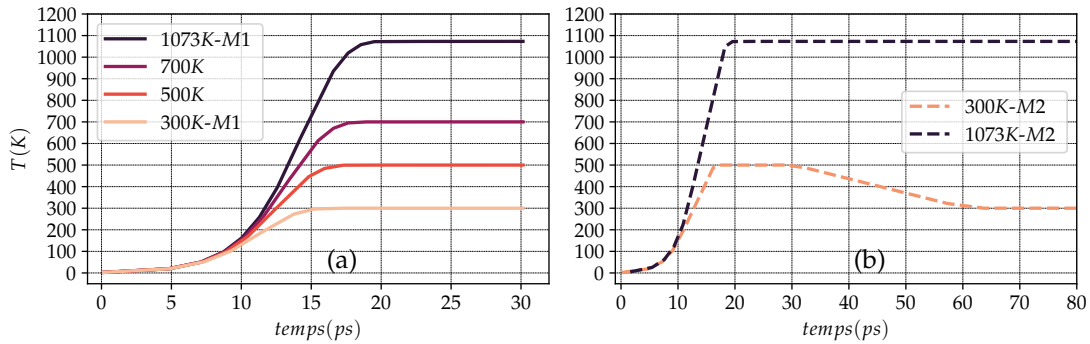


FIGURE 4.4 – Méthode de thermalisation : évolution de la température en fonction du temps pendant les étapes de thermalisation à 300K-M1, 500K, 700K et 1073K-M1 (a) ; à 300K-M2 et à 1073K-M2 (b).

amener le système à la température souhaitée. Plusieurs thermalisations sont mis en œuvre en utilisant le thermostat de Nose-Hoover [Hoover, 1985] avec l'ensemble NPT (le nombre d'atomes, la pression et la température sont maintenus constants) afin d'amener le système à des températures de 300K, 500K, 700K et 1073K. Les variations de température en fonction du temps pendant les étapes de thermalisation sont présentées sur la Figure 4.4. L'analyse de ces courbes montre que plus la température augmente, plus le temps nécessaire pour atteindre la température d'équilibre augmente. La vitesse de montée en température $\Delta T(K)/\Delta t(s)$ (c'est à dire la variation de la température en fonction du temps) est sensible au paramètre de relâchement, lequel est lié à la rapidité de la réponse du thermostat. Ce paramètre détermine la vitesse à laquelle la température est réajustée pendant la simulation (cf. section 2 du chapitre 2 pour plus de détails). En effet, comme on peut le voir sur la Figure 4.5, plus le paramètre de relâchement est grand, plus la vitesse de montée en température est faible, et donc, plus le temps mis pour atteindre la température d'équilibre est important. Dans le cadre de notre étude, ce paramètre de relâchement a été fixé égale à $100 * dt$ (avec dt le pas d'intégration = $1fs$), soit $\tau = 0.1ps$.

Comme la température moyenne la plus faible dans notre étude est de 300K, deux types de thermalisation ont été effectuées à cette température pour étudier l'impact du type de thermalisation effectuée sur l'évolution de la structure de dislocations de misfit avant sollicitation. La première méthode (nommée 300K-M1) consiste à chauffer le système jusqu'à une température de 300K pendant une durée de 15ps, puis le stabiliser pendant une durée de 15ps (Figure 4.4a). La seconde méthode (nommée 300K-M2) consiste à chauffer le système jusqu'à une température de 500K pour une durée de 18ps, le stabiliser pendant une durée de 15ps, puis le refroidir et stabiliser à une température de 300K pendant une durée de 47ps (Figure 4.4b). Les deux structures de dislocations obtenues pour les deux types de thermalisation à 300K sont présentées aux Figures 4.6b et 4.6c. Il apparaît sur ces figures

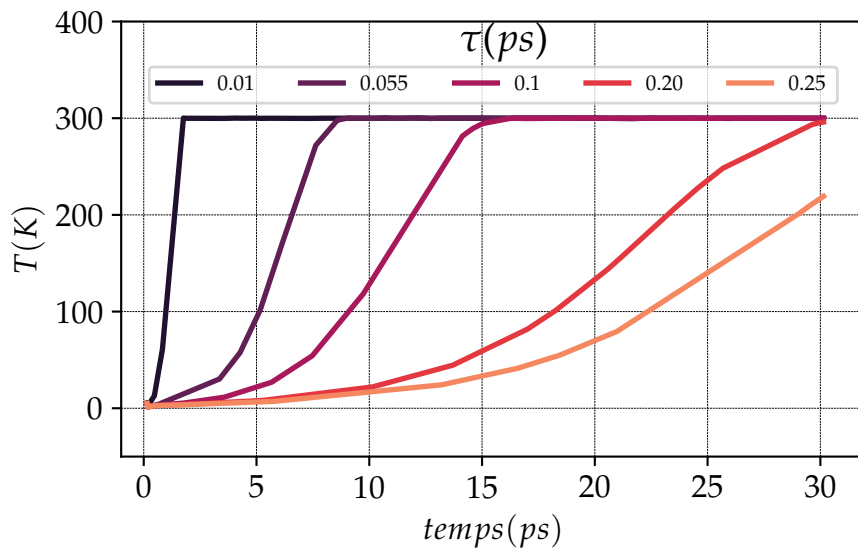


FIGURE 4.5 – Méthode de thermalisation : évolution de la vitesse de montée en température pendant l'étape de thermalisation à 300K-M2 en fonction du paramètre de relâchement τ en ps.

que la méthode de thermalisation peut avoir un impact sur la forme des dislocations de misfit. Pour des températures de 500K et 700K, seule la méthode de thermalisation M1 a été appliquée (Figure 4.4a). Les structures de dislocations de misfit obtenues pour ces deux températures après les étapes de thermalisation sont montrées aux Figures 4.6d et 4.6e. Pour évaluer l'effet de la durée de thermalisation sur la structure de dislocations de misfit, en fixant le même paramètre de relâchement, deux thermalisations ayant des durées de stabilisation différentes (30ps et 60ps) ont été réalisées à une température de 1073K (1073K-M1 et 1073K-M2), température la plus haute de notre étude (Figure 4.4b). Le traitement thermique (on parlera plutôt de thermalisation dans le cadre de notre étude) est une étape très importante dans l'étude du comportement mécanique des superalliages comme souligné dans ([Durand, 2021, Ma et al., 2016] ...). Les résultats obtenus en étudiant l'influence de la méthode de thermalisation à 300K et à 1073K sont présentés à la section B de l'annexe. Pour quantifier la représentativité des résultats, chaque calcul a été lancé trois fois, avec trois graines aléatoires différentes. Certains résultats obtenus en lançant le même calcul avec différentes conditions initiales (graines aléatoires) sont aussi montrés à la section B de l'annexe. Certains paramètres microstructuraux tels que la fraction volumique peuvent varier avec l'augmentation de la température. Cependant dans le cadre de cette étude, aucune variation significative de la fraction volumique en fonction de la température n'a été observée (Figure 4.7). Ceci peut être dû au fait que le temps de traitement thermique (thermalisation) est très faible. La fraction volumique (atomique) est calculée en

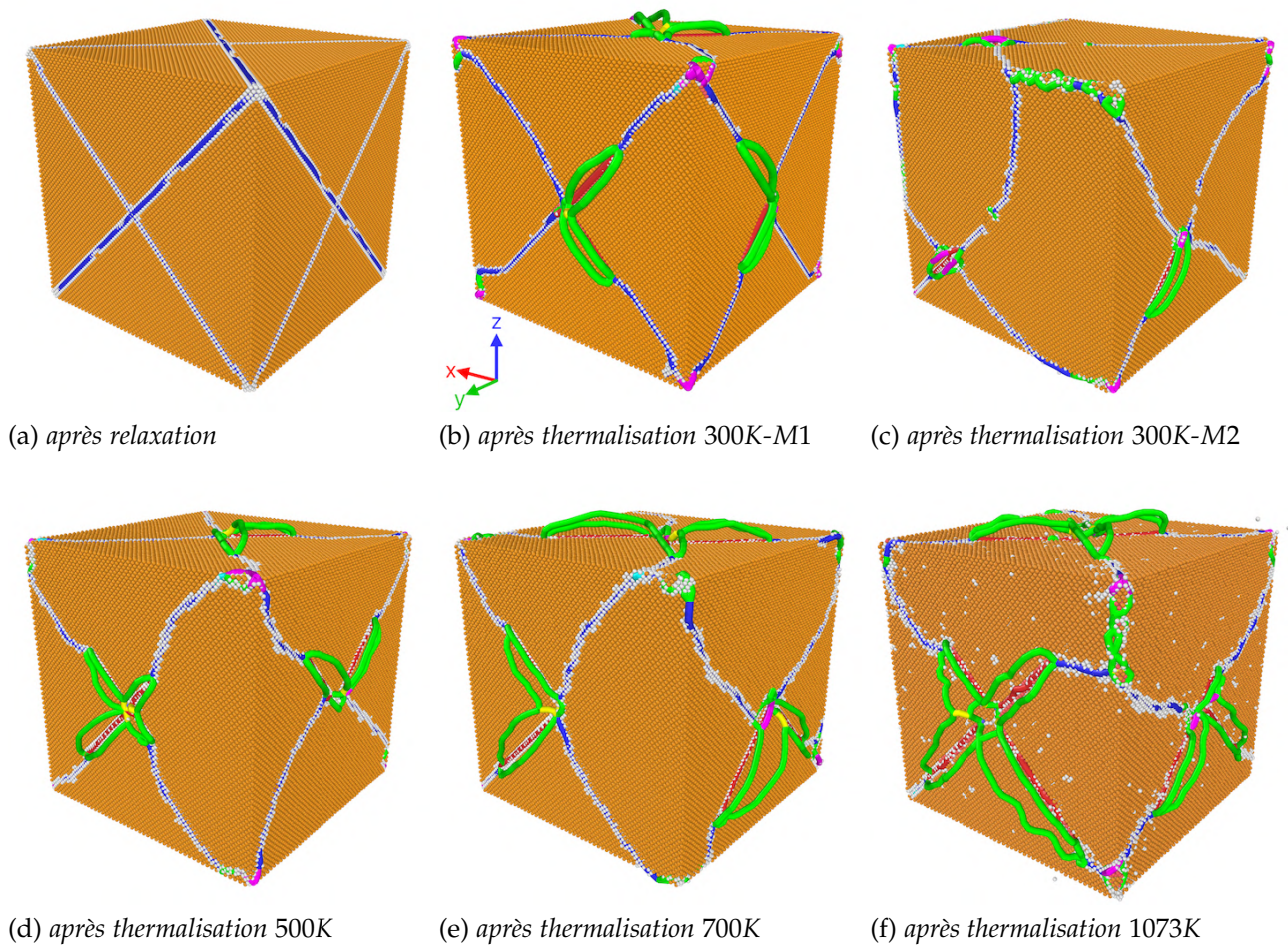


FIGURE 4.6 – Impact de la thermalisation aux températures de 300K, 500K, 700K et 1073K sur la structure de dislocations de misfit. (a)-Structure de dislocations de misfit obtenue après l'étape de relaxation avant thermalisation; (b)-Structure de dislocations de misfit obtenue avec la méthode 300K-M1; (c)-Structure de dislocations de misfit obtenue avec la méthode 300K-M2; (d)-Structure de dislocations de misfit obtenue à 500K; (e)-Structure de dislocations de misfit obtenue 700K et (f)-Structure de dislocations de misfit obtenue 1073K (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).

faisant le rapport entre le nombre d'atomes contenu dans la phase $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ et le nombre d'atomes total contenu dans le système.

Évaluation du coefficient de dilatation $\alpha_{300\text{K}-1073\text{K}}$

Expérimentalement, plusieurs méthode peuvent être utilisées pour évaluer le coefficient de dilatation d'un matériau [Hwang et al., 1984, Alman and Jablonski, 2004, Kim et al., 2012]. Dans le cadre de cette étude, la méthode utilisée par [Kim et al., 2012] a été choisie

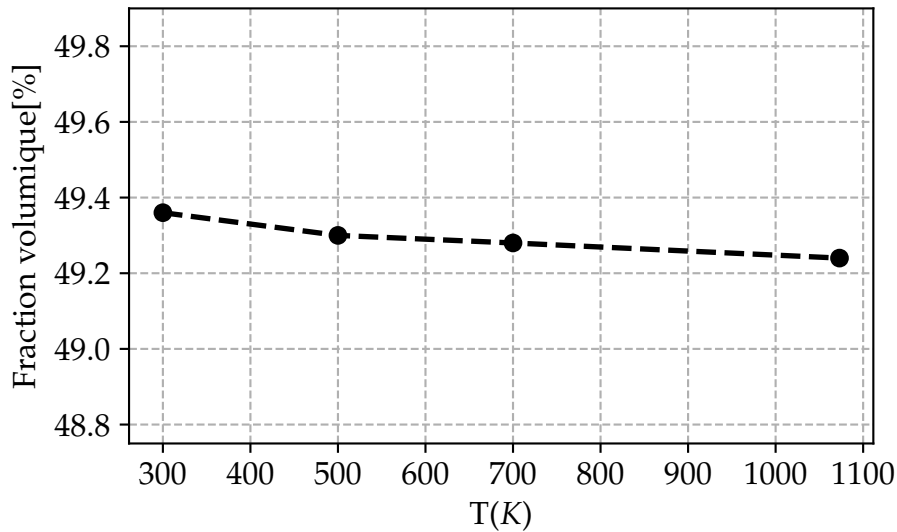


FIGURE 4.7 – Variation de la fraction volumique en fonction de la température pendant les étapes de thermalisation à 300K, 500K, 700K et 1073K.

pour évaluer le coefficient de dilatation du système. Ce dernier est composé d'un ensemble de particules (atomes) qui interagissent entre elles via un potentiel inter-atomique. Comme la pression est maintenue constante, avec l'augmentation de la température, le volume du système augmente selon une loi se rapprochant de la loi des gaz parfaits ($PV = NRT$). Le coefficient de dilatation permettant de caractériser cette augmentation à pression constante pour une variation de température allant de T_i à T_f peut être donné par l'expression suivante :

$$\alpha_{T_f-T_i} = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_{P=0} = \frac{\partial \ln(V/V_0)}{\partial T} \Bigg|_{P=0} \quad (4.2)$$

Dans cette expression, V_0 représente le volume du système à température (T) et à pression (P) nulle. (V) est le volume du système qui varie en fonction de la température. Pour estimer le coefficient de dilatation thermique dans le cadre de cette étude, les étapes suivantes ont été suivies :

- calcul du volume initial V_0 à température (T) et à pression (P) nulles,
- calcul du volume V à des températures de 300K, 500K, 700K et 1073K,
- calcul de la variation de la quantité $\ln(V/V_0)$ en fonction de la température,
- calcul du coefficient de dilatation thermique $\alpha_{300K-1073K}$ par détermination de la pente.

La variation de la quantité $\ln(V/V_0)$ en fonction de la température est donnée par la Figure 4.8. Ce coefficient de dilatation thermique a été calculé avec une microstructure contenant des renforts qui occupent une fraction volumique de 49.36% (soit une fraction atomique d'aluminium d'environ 12.72%). Pour des températures allant de 0K à 300K, une faible

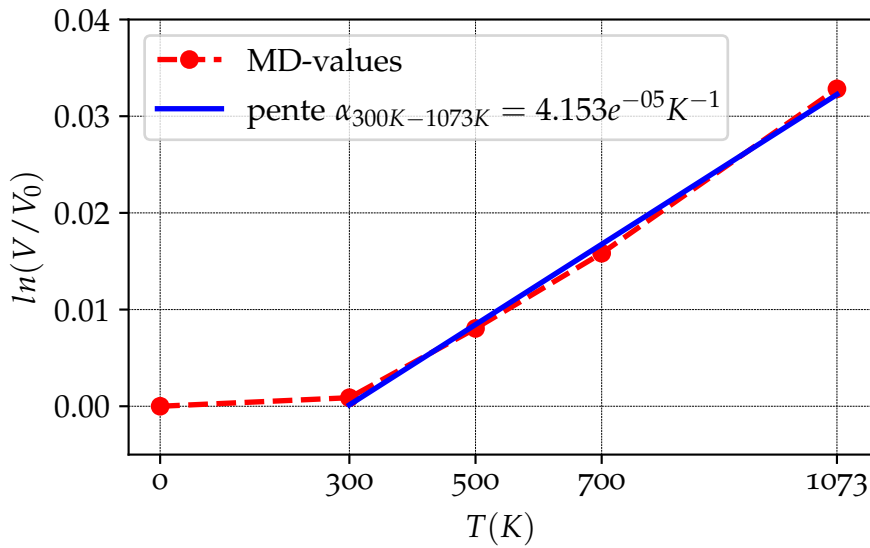


FIGURE 4.8 – Coefficient de dilatation thermique ($\alpha_{300K-1073K}$) estimé en se basant sur la variation du volume du système pendant les étapes de thermalisation à 300K, 500K, 700K et 1073K.

variation du volume est observée. La valeur obtenue pour des variations de températures allant de 300K à 1073K est du même ordre de grandeur que les valeurs trouvées dans la littérature [Hwang et al., 1984, Alman and Jablonski, 2004, Kim et al., 2012].

Conditions aux limites et calcul de contraintes

Pour étudier le comportement mécanique du matériau, des tests de traction et de compression uni-axiales ont été effectués avec une vitesse de déformation de 10^8s^{-1} dans la direction [001] (Figure 4.9). Afin d'avoir un réseau similaire à celui d'une structure macroscopique, des conditions aux limites périodiques ont été fixées dans les trois directions (Figure 4.9).

Concernant l'évaluation des contraintes, il a été choisi de se baser sur le théorème du Viriel qui relie les moyennes temporelles des énergies cinétiques et potentielles d'un système contenant plusieurs corps en interaction (cf. chapitre 2).

La pression axiale, définie comme étant l'opposé de la contrainte suivant une direction α, β ($\alpha, \beta = x, y, z$) est donnée par :

$$P_{\alpha,\beta} = -\sigma_{\alpha,\beta} = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_{i\alpha} v_{i\beta}}{V} + \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{N'} r_{i\alpha} * f_{i\beta}^{int}. \quad (4.3)$$

Dans cette expression, V_i représente le volume total du système, v_i est la vitesse de chaque

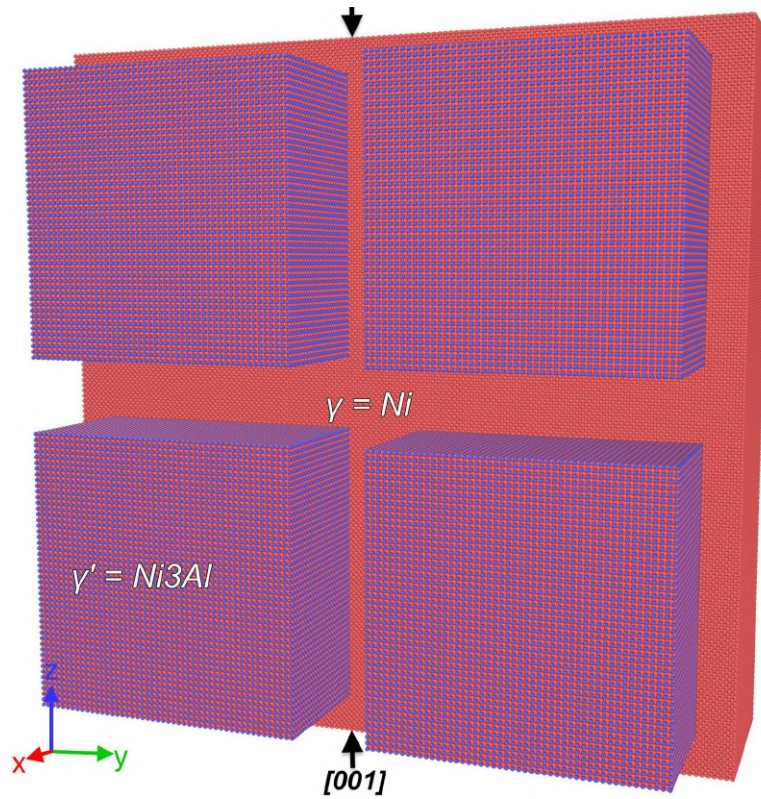


FIGURE 4.9 – Conditions aux limites : représentation de quatre cellules voisines pour visualiser l'emplacement des précipités par rapport à leurs voisins et indication des directions de chargement. Une partie des atomes appartenant à la matrice est supprimée pour mettre en évidence les deux phases $\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ (atomes de Ni en saumon et d'Al en bleu).

atome i de masse m_i dans une direction α, β et f^{int} correspond à la force d'interaction entre deux atomes séparés par une distance r_i .

Le tenseur des contraintes sur chaque atome i dans la direction α, β est donné par :

$$\sigma_{\alpha,\beta}^i = \frac{-1}{V_i} \left[\sum_{j=1}^{N'} r_{\alpha}^j f_{\beta}^{ij} + m_i v_{i\alpha} v_{i\beta} \right]. \quad (4.4)$$

Dans cette relation, V_i représente le volume de l'atome i de masse m_i et de vitesse v_i , interagissant avec ses j voisins dans les positions r_j . La lettre $N' > N$ ici indique que les atomes dans les boîtes voisines sont aussi pris en compte dans la sommation puisqu'on travaille avec des conditions aux limites périodiques. La contrainte de von Mises peut être alors en déduite selon l'expression :

$$\sigma_{vm} = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + 6(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xz}^2 + \sigma_{yz}^2)]^{1/2}. \quad (4.5)$$

La visualisation des résultats obtenus a été effectuée à l'aide des logiciels Ovito [Stukowski, 2009] et AtomViewer [Begau et al., 2011; 2012] dans lesquelles sont intégrés certaines méthodes d'analyses tels que l'algorithme d'extraction de dislocation, l'analyse du voisinage commun, l'analyse des angles de liaison ...

L'étude du comportement mécanique du système $\gamma' / \gamma\text{-Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ ci-après présentée, est conduite à l'aide des microstructures données par les Figures 4.6c, 4.6d, 4.6e et 4.6f, obtenues respectivement après les étapes de thermalisation à 300K-M2, 500K, 700K et 1073K-M1.

COMPORTEMENT MÉCANIQUE À TEMPÉRATURE AMBIANTE (300K)

Comportement mécanique en traction et en compression : influence du sens de sollicitation

La limite d'élasticité est définie comme étant la contrainte à partir de laquelle les premiers mouvements de dislocations sont observés (ce phénomène se caractérise par une déviation par rapport à la linéarité pendant le chargement). La résistance mécanique correspond à la contrainte maximale observée pendant le chargement plastique. Bien que cette manière de définir la résistance mécanique a déjà été utilisée [Zhang et al., 2022], elle n'est pas très pertinente au regard de la technique utilisée. En effet, comme il est très difficile d'effectuer des chargements jusqu'à la rupture avec les potentiels qui sont actuellement à notre disposition, cette valeur peut changer avec la variation du taux de déformation maximal. Néanmoins, dans certains cas, elle peut permettre d'avoir une meilleure compréhension des différences qui peuvent exister sur l'évolution des mécanismes de plasticité.

Les résultats obtenus en effectuant des tests de traction et de compression sur des microstructures composées d'une matrice $\gamma(\text{Ni})$ et des phases $\gamma'(\text{Ni}_3\text{Al})$ de forme cubique occupant une fraction volumique de l'ordre de 49% à température ambiante sont représentés sur la Figure 4.10. Les courbes en traction et en compression font apparaître des comportements différents. En effet, si le module d'élasticité reste le même quel que soit le sens de sollicitation, la limite d'élasticité (*Yield Stress*) de même que la résistance mécanique (*Yield Strength*) restent supérieures en traction. Ceci révèle l'existence d'une asymétrie en traction/compression en termes de limite d'élasticité et de résistance mécanique. Les différences de contrainte entre les limites d'élasticité et les résistances mécaniques en traction et en compression sont respectivement égales à 2.01GPa et 1.20GPa.

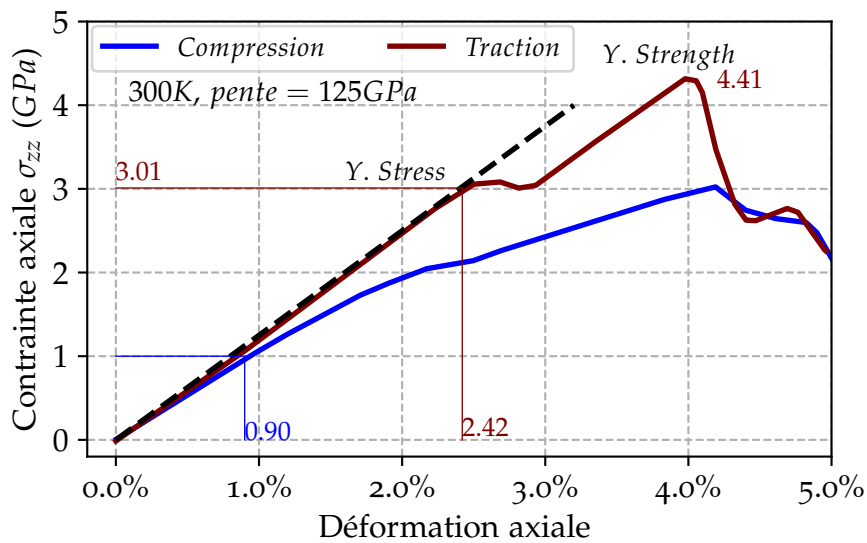


FIGURE 4.10 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K en compression et en traction à 300K : évolution de la contrainte σ_{zz} en fonction de la déformation suivant l'axe de sollicitation z .

Pour tenter de comprendre l'origine de cette asymétrie, les mécanismes de plasticité au niveau de l'interface et à l'intérieur du précipité pendant les chargements mécaniques en compression et en traction ont été considérés.

Mécanisme de plasticité au niveau de l'interface

La structure de dislocations de misfit qui se forme au niveau de l'interface entre les phases $\gamma(\text{Ni})$ et $\gamma'(\text{Ni}_3\text{Al})$ après l'étape de thermalisation à 300K est présentée sur la figure 4.11a. Comme il a été mentionné plus tôt, il apparaît clairement que la forme de la structure de dislocations de misfit obtenue après l'étape de thermalisation est déformée, comparé à celle obtenue après l'étape de minimisation (Figure 4.3b). Avant la sollicitation, il est observée une structure de dislocations qui est fermée et peu dissociée. Les premiers événements de plasticité observés au niveau de l'interface, marqués par une déviation par rapport à la linéarité sur les courbes de chargement mécaniques, correspondent à des dissociations supplémentaires et des glissements de dislocations de misfit résidents dans l'interface $\gamma(\text{Ni})/\gamma'(\text{Ni}_3\text{Al})$. Cette destruction partielle a lieu pour un niveau de déformation moins élevé en compression qu'en traction (0.90% en compression contre 2.42% en traction) (Figure 4.11b, 4.11c). Selon le sens de sollicitation, les dislocations qui sont en mouvement au début de la plasticité diffèrent. Au début de la plasticité, et lors d'une compression, les dislocations résidents dans les faces parallèles à l'axe de sollicitation sont en mouvement, alors qu'en traction, celles résidents dans les faces perpendiculaires à l'axe de

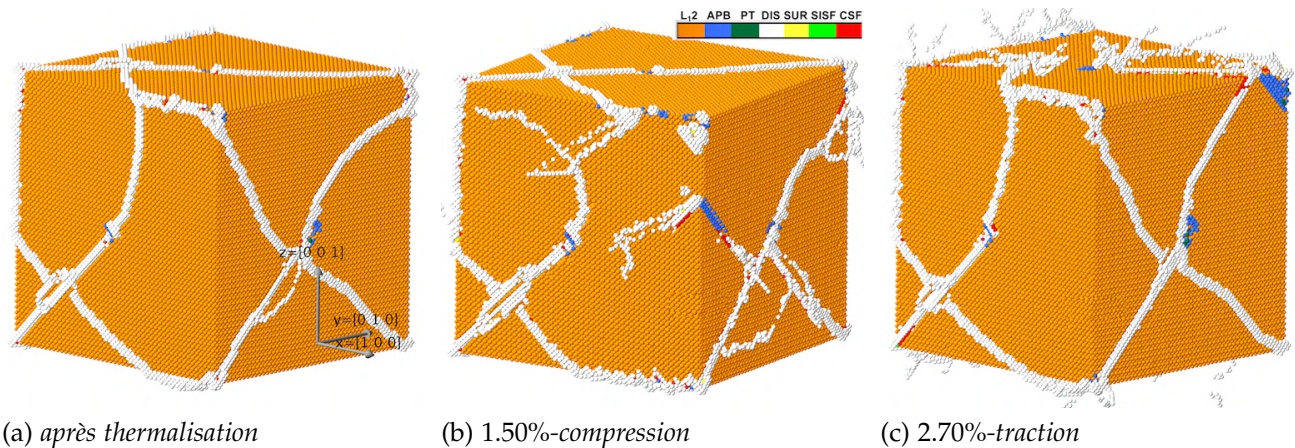


FIGURE 4.11 – Évolution de la structure de dislocations : (a)-après thermalisation à 300K, (b)-au début de la compression et (c)-au début de la traction.

sollicitation commencent le glissement (Figure 4.11b et 4.11c). Il faut noter que les lieux de glissement des dislocations, au début de la compression et de la traction sont principalement au niveau de l'interface et dans la matrice. Le début de ces mouvements de dislocations est observé à des niveaux de contrainte moins élevés en compression (1GPa) qu'en traction (3.01GPa).

Mécanisme de plasticité en compression

Lorsque le chargement augmente, les premières dislocations apparaissent dans le précipité. Le résumé du mécanisme de plasticité observé à l'intérieur du précipité en compression est donné à la Figure 4.12. Les premiers événements plastiques dans le précipité sont marqués par l'apparition de dislocations au niveau des coins et des arêtes pour un taux de déformation de 2.20%. Ces dislocations provenant de la dissociation des dislocations de misfit sont des partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$ qui peuvent glisser, soit individuellement en laissant derrière elles des défauts d'empilement complexes (CSF), soit par paires en laissant derrière elles des parois d'antiphase (APB) (Figure 4.12a). Une compression supplémentaire du système permettra à d'autres dislocations partielles de Shockley d'entrer à nouveau dans le précipité favorisant l'augmentation de la quantité de CSF. À un taux de déformation de 2.50%, le glissement dévié d'une paire de Shockley d'un plan $\{111\}$ vers un autre plan $\{111\}$ est observé. Le couple de dislocations se dirige ensuite vers l'interface laissant derrière elles une structure d'APB en forme de demi-pyramide (Figure 4.12b). Si le taux de compression augmente à 3.30%, en plus des glissements déviés observés dans les plans $\{111\}$, on assiste à l'interaction de dislocations partielles de Shockley de

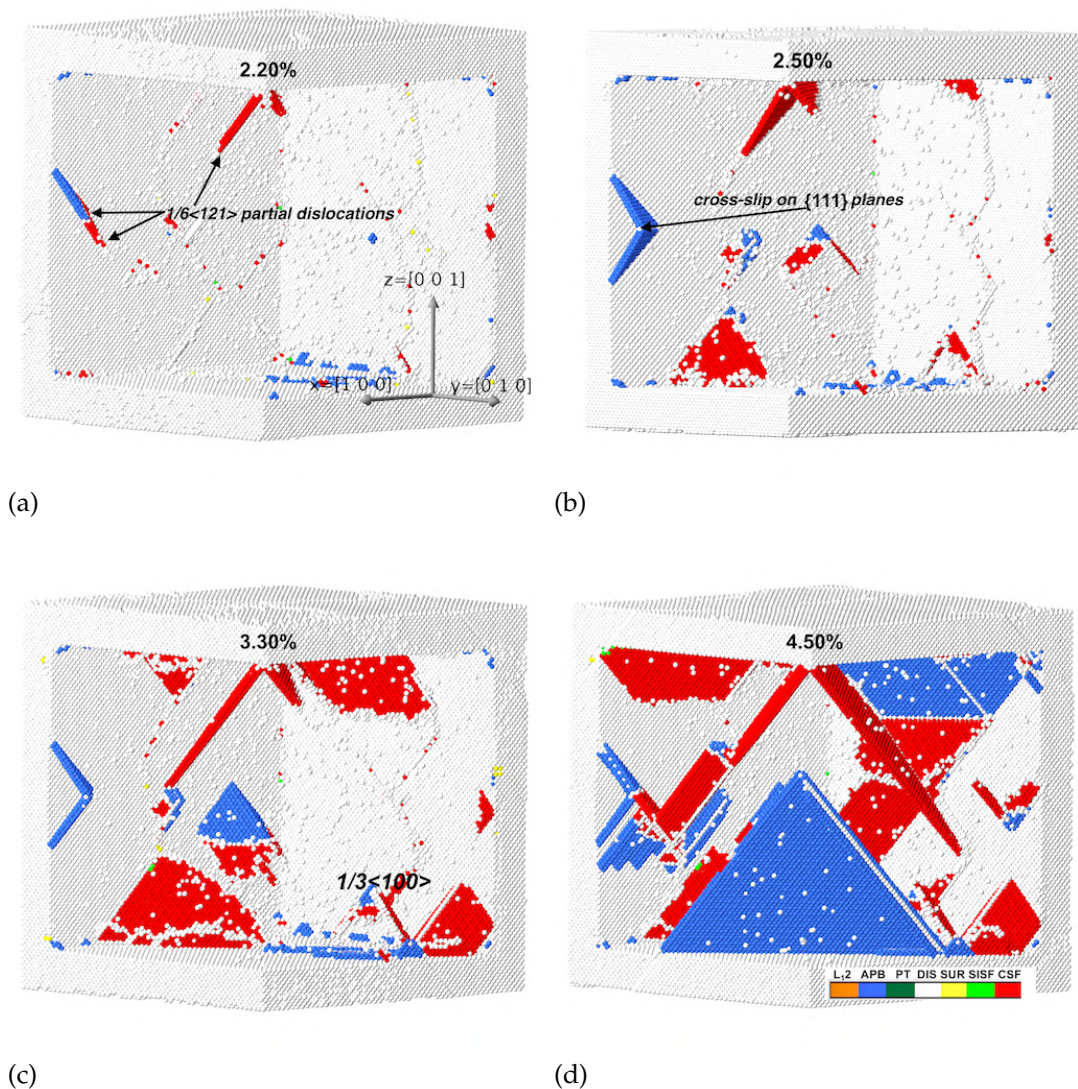


FIGURE 4.12 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K : évolution du mécanisme de plasticité lors de la sollicitation en compression. (a)-2.20% de déformation, (b)-2.50% de déformation, (c)-3.30% de déformation et (d)-4.50% de déformation (bleu : APB, rouge : CSF, blanc : matrice $\gamma - \text{Ni}$ et/ou dislocation, vert : PT). Seuls les mécanismes de plasticité se produisant dans la phase γ' sont ici représentés.

types $1/6 \langle 112 \rangle$ pour former des dislocations de vecteur de Burgers $1/3 \langle 100 \rangle$ qui sont de type sessile selon le même mécanisme que celui décrit dans [Amodeo and Lizoul, 2017, Salah et al., 2017, Bian and Wang, 2013]. Ces dislocations ont du mal à glisser dans le précipité et ont par conséquent un effet durcissant. Ceci peut expliquer l'absence de nouvelles chutes importantes sur la courbe contrainte – déformation jusqu'à un niveau de chargement de 4.00%. À ce niveau de chargement, la génération de nouvelles dislocations partielles, qui glissent par paires ou de manière individuelle, apparaît sur les plans adjacents aux défauts d'empilement préexistant pour transformer ces derniers en APB. C'est

la raison pour laquelle il est constaté une augmentation considérable de la quantité d'APB et de CSF à ce niveau (Figure 4.12d).

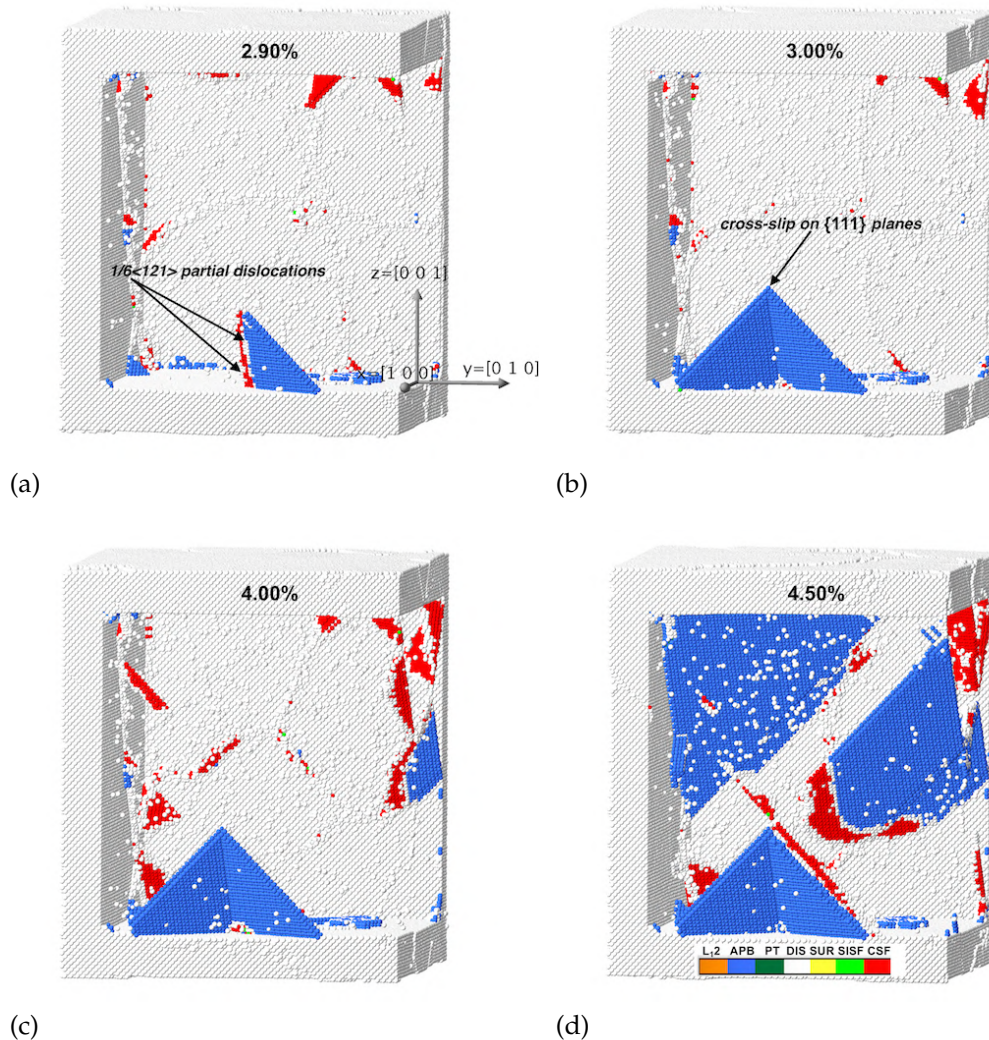


FIGURE 4.13 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K : évolution du mécanisme de plasticité lors de la sollicitation en traction. (a)-2.90% de déformation, (b)-3.00% de déformation, (c)-4.00% de déformation et (d)-4.50% de déformation (bleu : APB, rouge : CSF, blanc : matrice $\gamma - \text{Ni}$ et/ou dislocation, vert : PT). Seuls les mécanismes de plasticité se produisant dans la phase γ' sont ici représentés.

Mécanisme de plasticité en traction

En traction, le mécanisme obtenu au début du chargement est similaire à celui obtenu en compression à la différence qu'il apparaît moins de glissement de dislocations partielles de manière individuelle et plus de glissement par paires (Figure 4.13a, 4.13b, 4.13c,

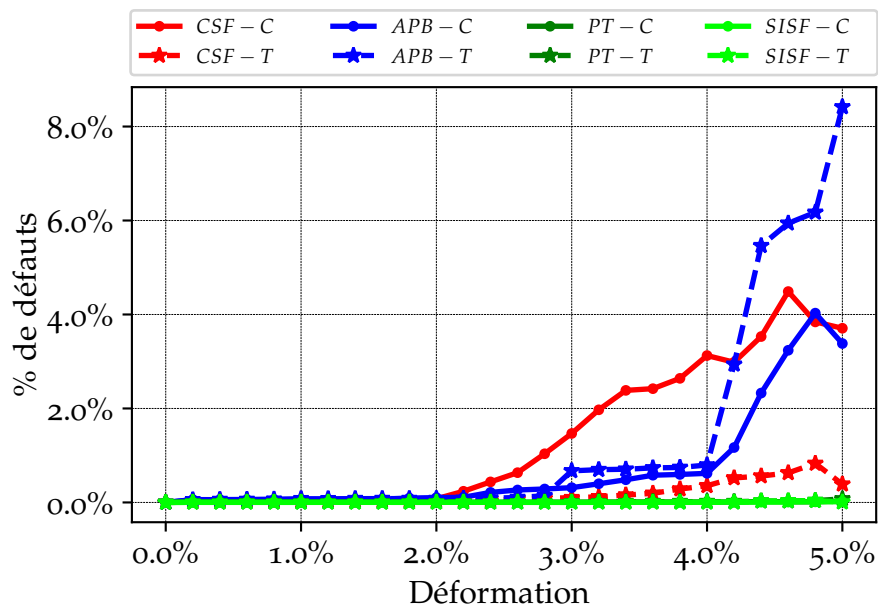


FIGURE 4.14 – Comportement mécanique en compression et en traction à 300K : évolution des quantités d'APB (paroi d'antiphase), de CSF (défauts d'empilement complexes), de PT (pseudo macles) et de SISF (défauts d'empilement super intrinsèques) en fonction de la déformation en traction (T) et en compression (C) à 300K.

4.13d). En conséquence, contrairement à ce qui est observé en compression, il se forme une quantité d'APB plus importante, ainsi qu'une plus faible quantité de CSF. Les structures d'APB en forme de demi-pyramide observées, après des changements de plan de glissement des dislocations, sont plus grandes en traction qu'en compression (Figure 4.13b). Pour des chargements plus élevés, le mécanisme de plasticité reste gouverné par du glissement par paires de dislocations favorisant l'augmentation de la quantité d'APB (Figure 4.13c et 4.13d).

Les courbes de la Figure 4.14 montrent l'évolution des quantités de défauts en fonction de la déformation pendant les sollicitations en traction et en compression. Les quantités de défauts sont estimées en faisant le rapport, entre le nombre d'atomes que contient le défaut divisé par le nombre d'atomes total dans la phase $\gamma\text{-Ni}_3\text{Al}$ avant sollicitation. L'analyse des courbes montre qu'il se forme en traction plus d'APB que de CSF, alors qu'en compression la tendance inverse est observée. En ce qui concerne le sens de sollicitation, la quantité d'APB qui se forme en traction est plus importante que celle obtenue en compression, tandis que la quantité de CSF formée reste plus importante en compression qu'en traction.

Du fait des conditions de simulation (taille du système, vitesse de déformation, temps de simulation . . .), on ne peut faire de confrontations directes avec des études expérimentales. Néanmoins, on peut noter que les résultats obtenus suivent la même tendance que ceux

obtenus par [Shah and Duhl, 1984], et ce malgré les hypothèses considérées en réalisant les simulations. En effet, en faisant des tests de traction et de compression sur le superalliage PWA1480, [Shah and Duhl, 1984] avaient observé, en étudiant les mécanismes de plasticité, des écarts entre les dislocations partielles plus importants en compression qu'en traction (c'est-à-dire la formation de CSF plus importante en compression qu'en traction).

COMPORTEMENT À HAUTES TEMPÉRATURES (500K, 700K ET 1073K)

Description du comportement mécanique

Les études menées sur le comportement mécanique du matériau étudié à hautes températures ont été conduites en effectuant des tests de compression et de traction après thermalisation sur les microstructures représentées sur les Figures 4.6d, 4.6e et 4.6f. Les comportements obtenus en compression et en traction pour les différentes températures sont représentés à la Figure 4.15. L'analyse des courbes montrent que quel que soit le

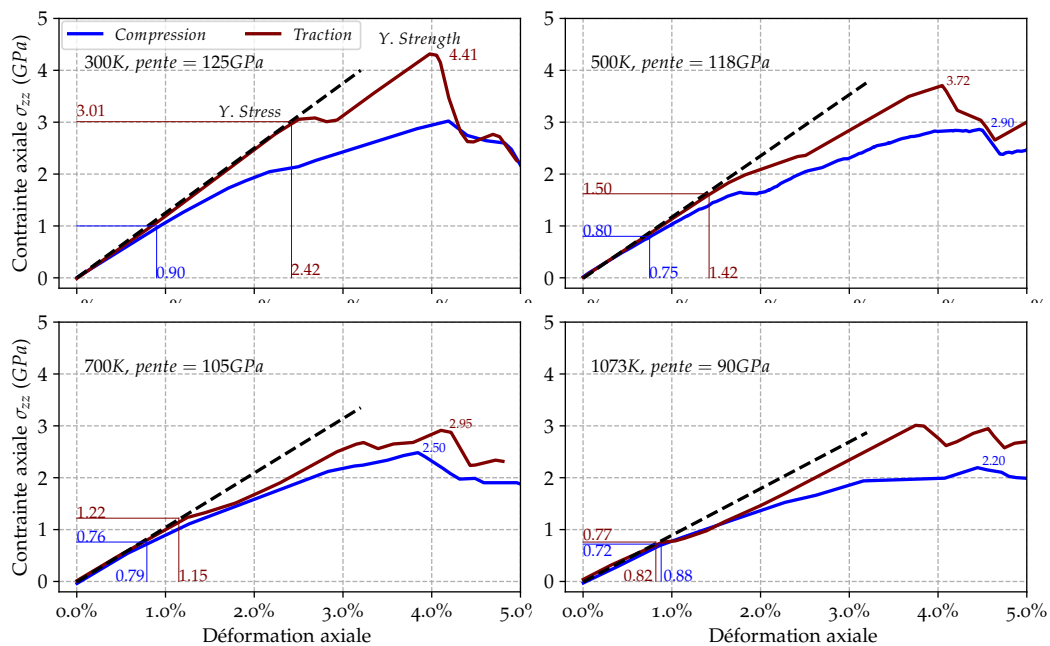


FIGURE 4.15 – Comportement mécanique du système Ni₃Al/Ni à 300K, 500K, 700K et 1073K : courbes de contrainte-déformation obtenues en effectuant des tests de compression (en bleu) et de traction (en marron) selon la direction [001].

sens de sollicitation, le module et la limite d'élasticité diminuent avec l'augmentation de la température. Pour une variation de température allant de 300K à 1073K, la variation

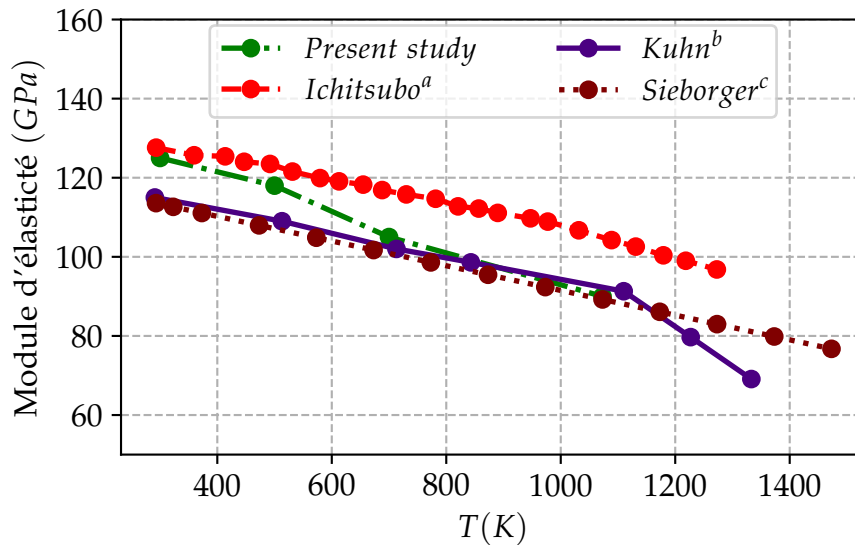


FIGURE 4.16 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K, 500K, 700K et 1073K : variation du module d'élasticité en fonction de la température. Les valeurs obtenues avec nos simulations sont comparées avec des valeurs issues de la littérature ([Ichitsubo et al., 2003]^a, [Kuhn and Sockel, 1988]^b, [Siebörger et al., 2001]^c).

du module d'élasticité passe de 125GPa à 90GPa. Les valeurs obtenues en fonction de la température avec les simulations sont en bon accord avec celles issues de la littérature (Figure 4.16). Les valeurs de limite d'élasticité enregistrées en faisant varier la température de 300K à 1073K en traction et en compression passent respectivement de 3.01GPa à 0.77GPa et de 1GPa à 0.72GPa. Concernant la résistance mécanique, pour des températures allant de 300K à 700K, une diminution de sa valeur est notée quel que soit le sens de sollicitation : la valeur de la résistance mécanique en compression et en traction passe respectivement de 3GPa à 2.50GPa et de 4.41GPa à 2.95GPa. En revanche, pour une variation de température allant de 700K à 1073K, si en compression, la valeur de la résistance mécanique passe de 2.50GPa à 2.20GPa, en traction, elle augmente en passant de 2.95GPa à 3.00GPa.

Avec l'augmentation de la température, il est important de souligner que, même si les modules d'élasticité restent indépendant du sens de sollicitation, l'écart observé entre les limites d'élasticité en traction et en compression diminue. La Figure 4.17 montre l'évolution de cet écart en fonction de la température qui est représenté par le rapport entre les limites d'élasticité en traction et en compression (Y_T/Y_C). Ce dernier passe d'une valeur de 3.01 à une valeur de 1.07 pour une variation de température allant de 300K à 1073K. L'écart enregistré entre les résistances mécaniques en traction et en compression, représenté par le rapport (R_T/R_C), diminue aussi. Pour une variation de température allant de 300K à 700K, ce rapport passe d'une valeur de 1.4 à une valeur de 1.18, mais augmente ensuite en évoluant d'une valeur de 1.18 à une valeur de 1.36 pour une variation de température

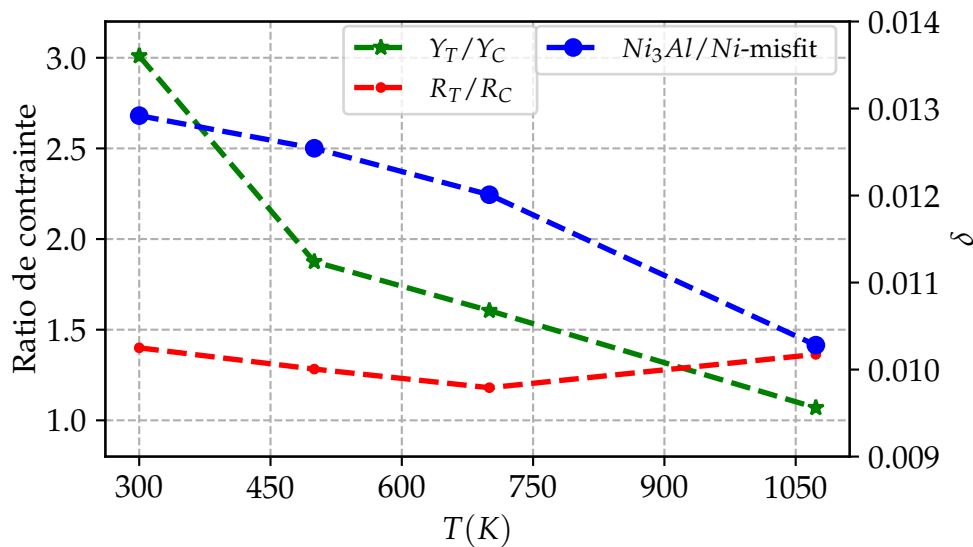


FIGURE 4.17 – Comportement mécanique du système Ni₃Al/Ni à 300K, 500K, 700K et 1073K : variation de l’asymétrie sur la limite d’élasticité (Y_T/Y_C) et sur la résistance mécanique (R_T/R_C) en fonction de la température. La variation du paramètre de misfit Ni₃Al/Ni-misfit (δ) en fonction de la température est aussi représentée.

allant de 700K à 1073K (Figure 4.17). Ces différentes observations, montrent que le comportement mécanique du matériau étudié dépend de la température quel que soit le sens de sollicitation. Néanmoins, en fonction de la gamme de températures considérée (entre 300K et 700K ou entre 700K à 1073K), différentes tendances peuvent être observées sur la variation des propriétés mécaniques et plus spécifiquement sur la variation de l’asymétrie en traction/compression de la limite d’élasticité et de la résistance mécanique.

Description du mécanisme de plasticité

Avec l’augmentation de la température, une augmentation de la densité de dislocations de misfit est observée sous l’effet de l’agitation thermique (Figure 4.18). En début de plasticité, les premiers mouvements de dislocations, hormis la plasticité de la matrice à proprement parler, apparaissent au niveau de l’interface. La Figure 4.19 montre l’évolution des structures de dislocations pour des températures de 500K, 700K et 1073K au début de la compression et de la traction. De la même manière qu’à température ambiante (300K), les dislocations mises en mouvement dans les différentes faces du précipité, diffèrent selon le sens de sollicitation. En effet si en traction, les dislocations résidents dans les deux faces perpendiculaires à l’axe de sollicitation pilotent les premiers événements plastiques, en compression, celles qui sont dans les quatre faces parallèles à l’axe de sollicitation commencent le glissement au début de la plasticité. Concernant le mécanisme de plasticité à

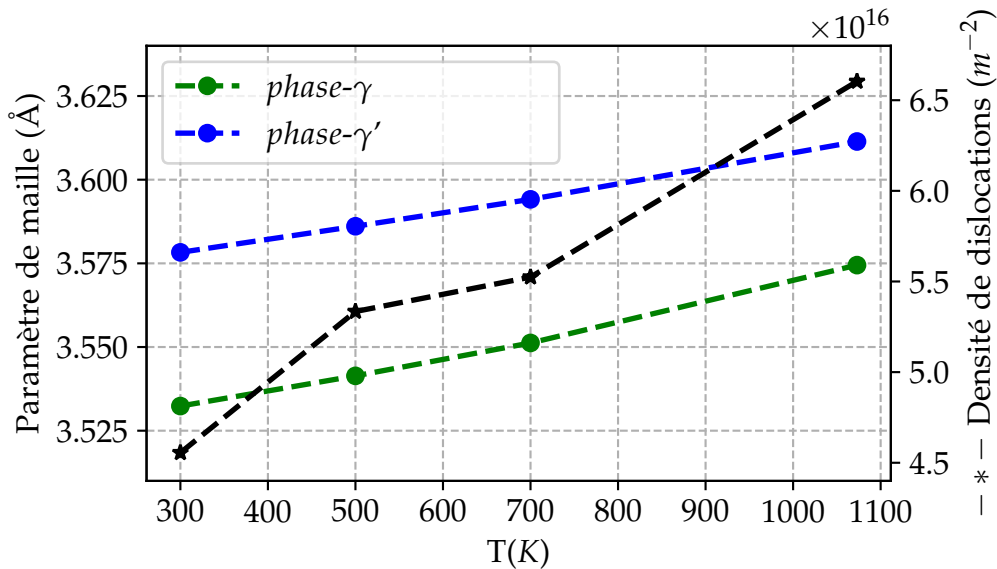


FIGURE 4.18 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K, 500K, 700K et 1073K : évolution de la densité de dislocations de misfit et des paramètres de mailles des phases $\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ en fonction de la température.

l'intérieur du précipité, des modes de déformations similaires à ceux identifiés à température ambiante (300K) sont observés. À cause du bruit causé par l'agitation thermique, seul le mécanisme de plasticité à 700K sera montré dans cette partie (le résumé des mécanismes de plasticité obtenus à 500K et à 1073K est montré dans la section C de l'annexe). Le résumé du mécanisme de plasticité obtenu en compression à une température de 700K est indiqué à la Figure 4.20. Le mécanisme de plasticité dans le précipité commence à une déformation d'environ 2.30% avec la nucléation de dislocations partielles de Shockley qui vont glisser vers l'intérieur du précipité dans les plans $\{111\}$ en laissant derrière elles des CSF (Figure 4.20a). Si le chargement augmente, d'autres dislocations partielles glissant, dans les plans adjacents aux CSFs existant, nucléent, ce qui favorise la transformation d'une partie des CSFs en APB (Figure 4.20b et 4.20c). Pendant la compression, les structures d'APB en forme de demi-pyramide dues aux glissements déviés des plans $\{111\}$ vers d'autres plans $\{111\}$ observés à température ambiante sont aussi obtenues à hautes températures (Figure 4.20d). Une augmentation du taux de compression favorise le glissement d'autres dislocations partielles de Shockley (souvent par paires) qui glissent toujours dans les plans adjacents aux plans de formation des défauts préexistant et favorisent donc en partie l'augmentation de la quantité d'APB ainsi que la diminution de la quantité de CSF (Figure 4.20c et 4.20d).

En traction (Figure 4.21), le mécanisme de plasticité commence avec la nucléation d'une dislocation partielle de Shockley qui est suivie d'une seconde. Ces deux dislocations vont

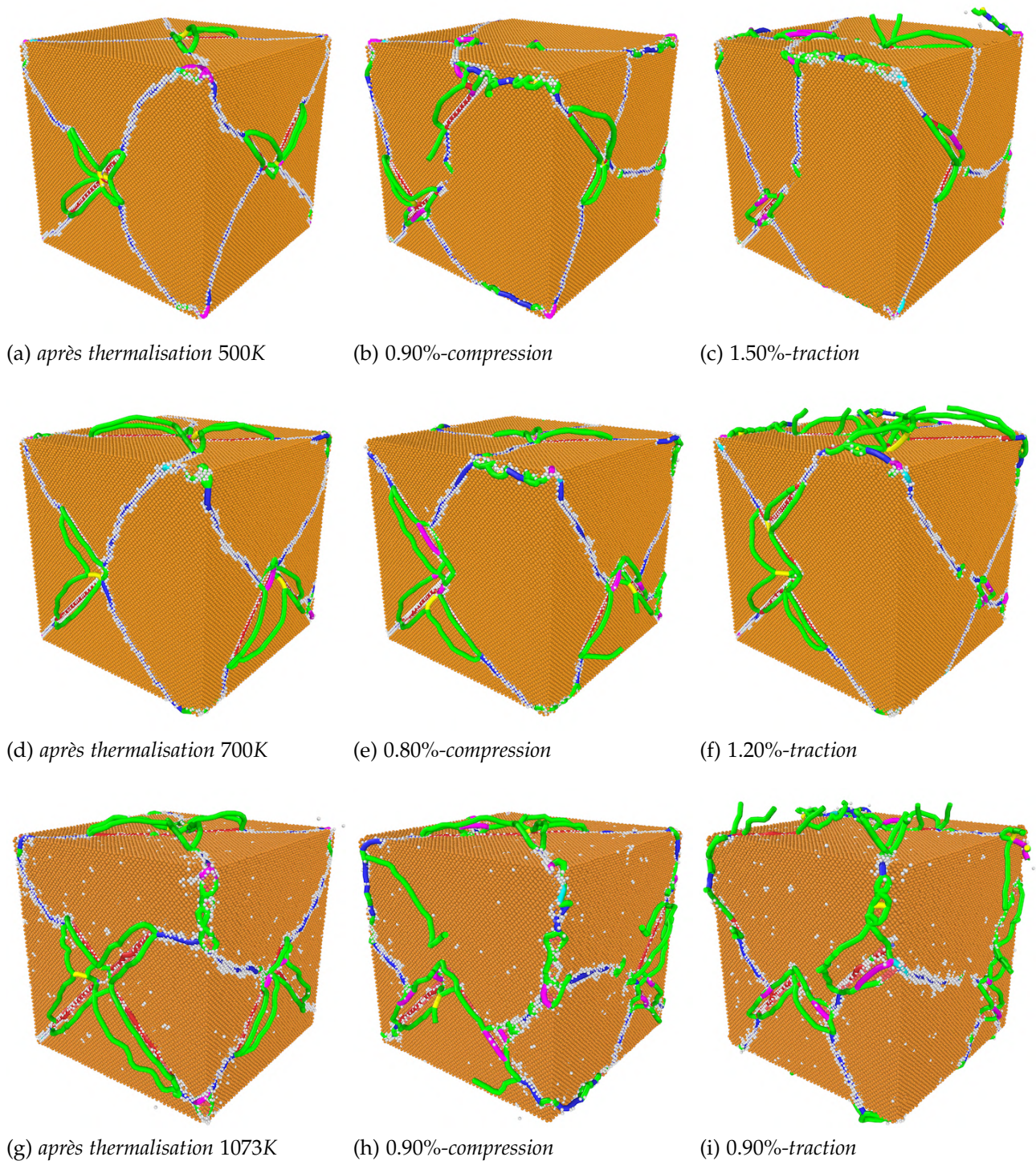


FIGURE 4.19 – Evolution de la structure de dislocations de misfit à 500K, 700K et 1073K : (a, d, g)-après l'étape de thermalisation, (b, e, h)-au début de la compression et (c, f, i)-au début de la traction (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).

former une paire de dislocations qui glisse en laissant derrière elle des *APBs* (Figure 4.21a et 4.21b). À un niveau de chargement d'environ 1.6%, il apparaît un glissement d'une paire de dislocations d'un plan $\{111\}$ vers un autre plan $\{111\}$, entraînant la formation d'une structure en demi-pyramide similaire à celle formée à température ambiante (Figure 4.21c). L'augmentation du chargement entraîne la nucléation d'autres paires de dislocations partielles favorisant l'augmentation de la quantité d'*APB* formées (Figure 4.21d).

Contrairement aux mécanismes de plasticité observés à température ambiante, il est constaté une diminution de l'activité des dislocations partielles de Shockley à l'intérieur du précipité, lorsque la température augmente. La Figure 4.22 montre l'évolution des quantités moyennes de défauts (Q_{md}) formés pendant de la déformation en fonction de la température. Les quantités moyennes de défauts formés pour chaque température sont calculées comme suit :

- il est choisi les mêmes niveaux de déformation avec un incrément de déformation fixe de 0.2% ;
- puis est calculée la somme des défauts formés avec les niveaux de déformation fixés ;
- enfin, la somme des défauts formés est divisée par le nombre de niveau de déformation imposé.

L'équation 4.6 suivante donne l'expression permettant de calculer la quantité moyenne de défaut à chaque température T_i :

$$Q_{md}(T_i) = \frac{\sum_{i=1}^{N_d} q_i}{N_d}. \quad (4.6)$$

Dans cette expression, les N_d sont les niveaux de déformation fixés, q_i représente la quantité de défauts à un niveau de déformation i à la température T_i .

Les valeurs des quantités moyennes de défauts formés pendant la déformation en compression et en traction sont représentés dans le tableau 4.1. Les écart-types correspondant aux moyennes calculées sont aussi indiqués pour mettre en évidence l'hétérogénéité de la variation des quantités de défauts pendant la déformation. En compression, lorsque la température passe de 300K à 500K, il est constaté une diminution de la quantité moyenne de *CSF* ainsi qu'une légère augmentation de la quantité d'*ABP*. À une température de 700K, la quantité moyenne d'*APB* formées lors de la sollicitation en compression devient même supérieure à la quantité de *CSF* formées. Ce résultat est différent des mécanismes observés à température ambiante où se forme une quantité de *CSF* plus importante que celle d'*APB*. Pour une variation de température allant de 700K à 1073K, il est constaté une légère diminution de la quantité moyenne d'*APB* formées due à la diminution des acti-

<i>Compression</i>	<i>CSF</i> (%)	<i>APB</i> (%)	<i>PT</i> (%)	<i>SISF</i> (%)
300K	1.36 ± 0.75	0.72 ± 0.57	$8 * 10^{-3}$	$3 * 10^{-3}$
500K	0.98 ± 0.56	0.82 ± 0.64	$6 * 10^{-3}$	$8 * 10^{-3}$
700K	0.64 ± 0.32	0.78 ± 0.61	$7 * 10^{-2}$	$3 * 10^{-3}$
1073K	0.62 ± 0.35	0.65 ± 0.43	$2 * 10^{-2}$	$1 * 10^{-3}$
<i>Traction</i>	<i>CSF</i> (%)	<i>APB</i> (%)	<i>PT</i> (%)	<i>SISF</i> (%)
300K	0.18 ± 0.11	1.32 ± 1.16	$1 * 10^{-2}$	$5 * 10^{-3}$
500K	0.16 ± 0.08	1.13 ± 0.87	$2 * 10^{-2}$	$5 * 10^{-2}$
700K	0.13 ± 0.09	1.06 ± 0.58	$1 * 10^{-2}$	$2 * 10^{-2}$
1073K	0.18 ± 0.05	0.64 ± 0.42	$1 * 10^{-2}$	$6 * 10^{-3}$

TABLE 4.1 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K, 500K, 700K et 1073K : évolution des quantités moyennes de défauts dans le précipité lors des sollicitations en compression et en traction (les barres d'erreur représentent les écarts types sur les moyennes calculées).

vités des dislocations dans le précipité. Les quantités d'*APB* et de *CSF* deviennent alors similaires.

En traction, étant donné que le mécanisme de plasticité est en grande partie piloté par du glissement des dislocations par paire, pour toutes les températures, les quantités moyennes d'*APB* formées restent supérieures aux quantités moyennes de *CSF*. Avec l'augmentation de la température, on observe la diminution des quantités moyennes d'*APB* du fait de la diminution de l'activité des dislocations dans le précipité.

En considérant l'évolution des quantités de défauts en fonction du sens de sollicitation, pour un intervalle de température allant de 300K à 700K, la quantité moyenne d'*APB* formées en traction reste supérieure à celle formées en compression pendant que la tendance inverse est observée sur la quantité moyenne de *CSF* formées. Néanmoins, l'écart entre les quantités moyennes d'*APB* formées en traction et en compression diminue avec l'augmentation de la température. À une température de 1073K, les quantités moyennes d'*APB* formées en traction et en compression deviennent similaires. L'écart entre les quantités moyennes de *CSF* formées en traction et en compression diminue aussi. Cependant, la quantité moyenne de *CSF* formées en compression reste supérieure à celle formées en traction. Les quantités moyennes de *CSF* formées en traction, ainsi que les quantités moyennes de *PT* et de *SISF* formées en compression et en traction, sont faibles comparées aux quantités de *CSF* formées en compression ainsi que les quantités moyennes d'*APB* formées en traction et en compression.

Les écart-types mesurés sur les quantités de *CSF* et d'*APB*, respectivement en compression et en traction diminuent avec l'augmentation de la température.

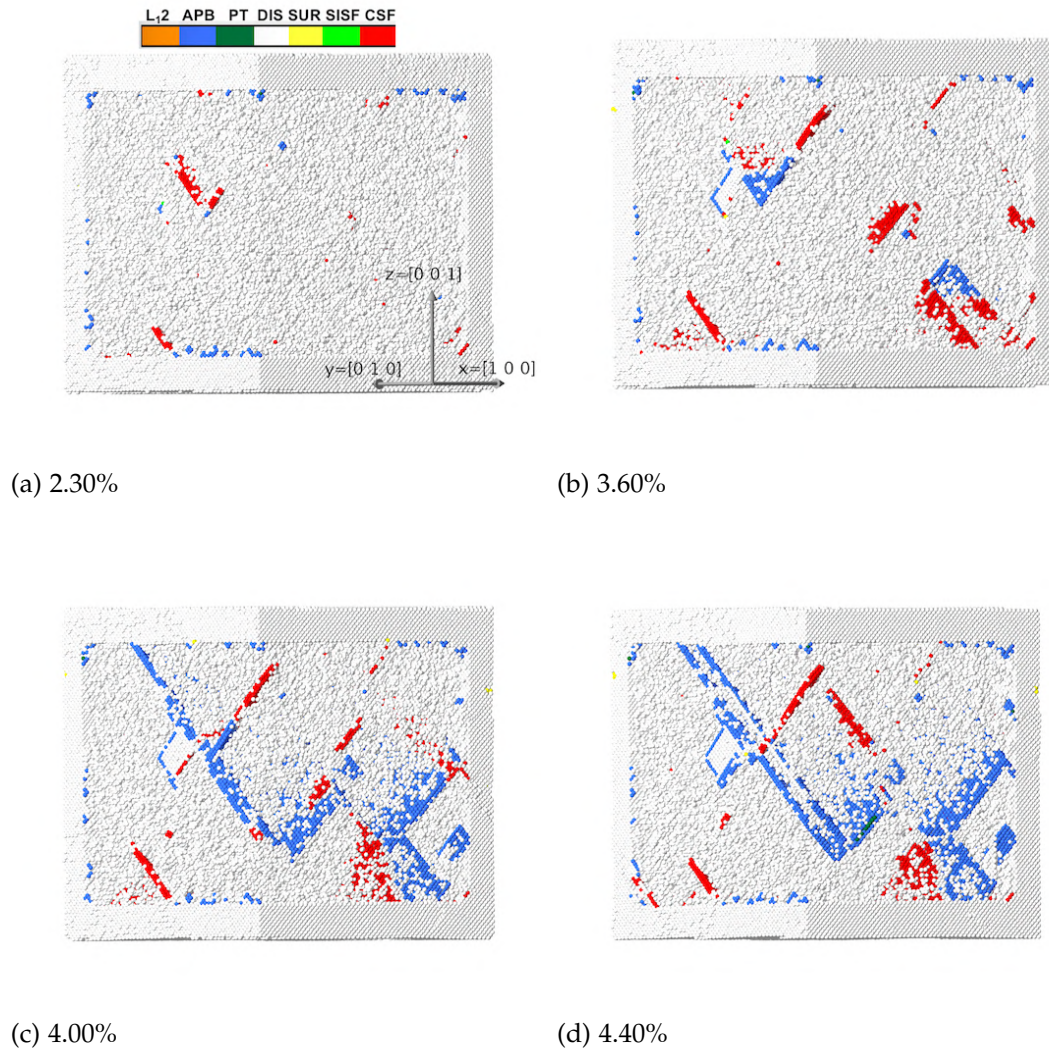


FIGURE 4.20 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 700K : évolution des mécanismes de plasticité lors de la sollicitation en compression (bleu : APB, rouge : CSF, blanc : matrice $\gamma - \text{Ni}$ et/ou bruit, vert : PT). Seuls les mécanismes de plasticité se produisant dans la phase γ' sont ici représentés.

DISCUSSION

Il a été mis en évidence une diminution du module et de la limite d'élasticité en fonction de la température, quel que soit le sens de sollicitation. Ces résultats sont en bon accord avec les données disponibles sur le comportement mécanique des superalliages γ/γ' , notamment ceux à faible fraction ([Davies and Stoloff, 1965]). Les cartes de contrainte de von Mises observées pendant le chargement élastique (Figure 4.23a, 4.23c) et au début de la plasticité (Figure 4.23b, 4.23d) montrent que la concentration de contrainte reste localisée au niveau des endroits où les dislocations de misfit se forment, et ceci, quel que soit le sens de sollicitation. Plus la température augmente, plus on assiste à l'évolution du réseau de dislocations de misfit par dissociation de dislocations sous l'effet de l'agitation thermique, ce qui se traduit par une augmentation de sa densité de dislocations (Figure 4.18). L'augmentation de la densité de dislocations entraîne la baisse du module et de la limite d'élasticité.

Pour comprendre la source de l'asymétrie en traction/compression observée sur la limite d'élasticité, il a été conduit une étude du mécanisme de plasticité au début du chargement. À température ambiante (300K), au début du chargement, le mécanisme de plasticité est piloté par les dislocations localisées au niveau de l'interface entre les phases $\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$. Les simulations ont montré que les dislocations qui sont en mouvement dans les différentes faces du précipité diffèrent selon le sens de sollicitation (Figures 4.11b et 4.11c). En effet, au début de la plasticité, en traction, les dislocations résidant dans les deux faces perpendiculaires à l'axe de sollicitation sont en mouvement. En compression, ce sont celles qui sont localisées dans les quatre faces parallèles à l'axe de sollicitation qui sont en mouvement. Il faut noter qu'à ce niveau de chargement, il n'a pas été observé de dislocations dans le précipité et que tout se passe au niveau de l'interface et dans la matrice, contrairement aux comportements montrés par [Zhang et al., 2022] où les dislocations interfaciales se décomposent dans la matrice $\gamma\text{-Ni}$ en traction uni-axiale et dans la phase $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ en compression uni-axiale.

Pendant la sollicitation en traction, les dislocations résidant dans les deux faces perpendiculaires à l'axe de sollicitation sont poussées vers la matrice alors que celles qui se trouvent dans les quatre faces parallèles à l'axe de sollicitation sont poussées vers le précipité. Comme, il est plus facile pour les dislocations de glisser au niveau de l'interface ou

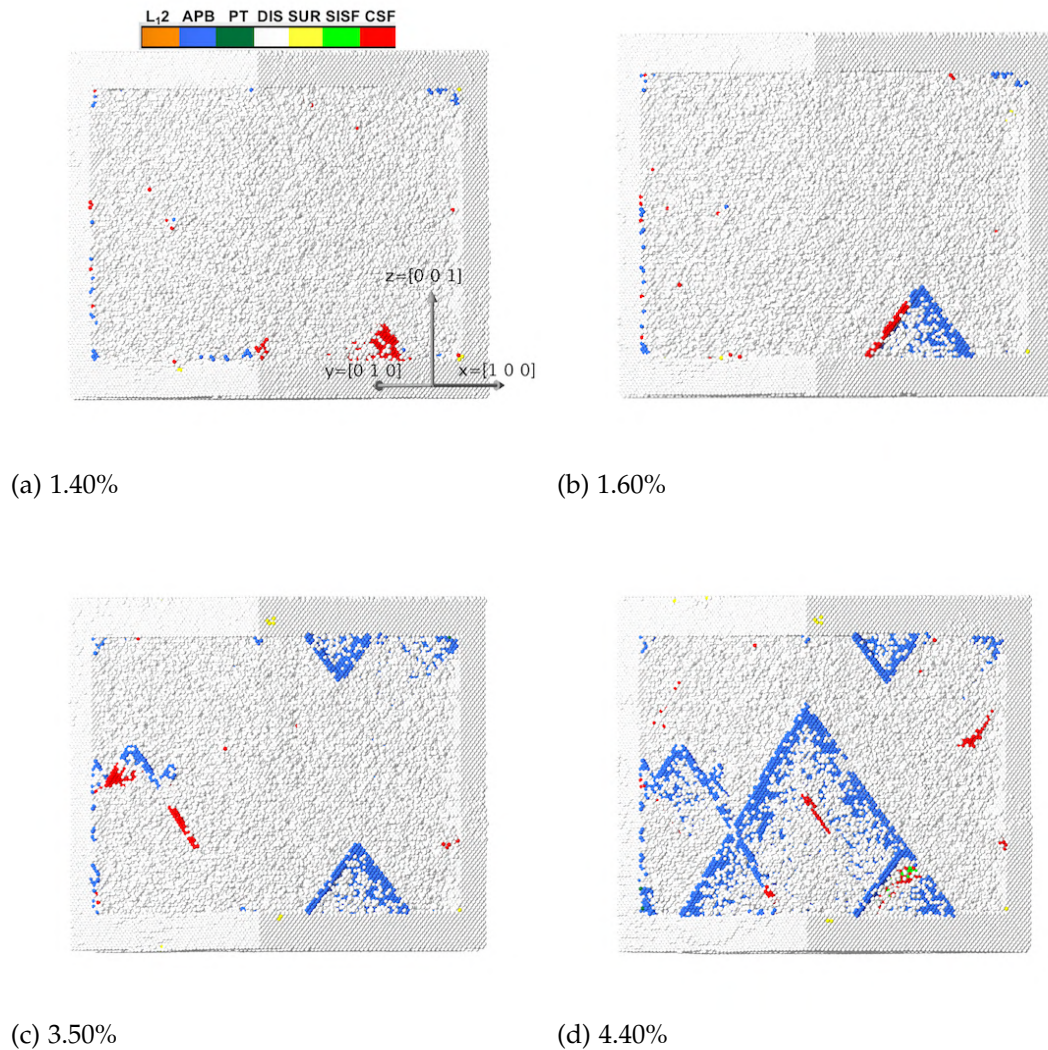


FIGURE 4.21 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 700K : évolution des mécanismes de plasticité lors de la sollicitation en traction (bleu : APB, rouge : CSF, blanc : matrice $\gamma - \text{Ni}$ et/ou bruit, vert : PT). Seuls les mécanismes de plasticité se produisant dans la phase γ' sont ici représentés.

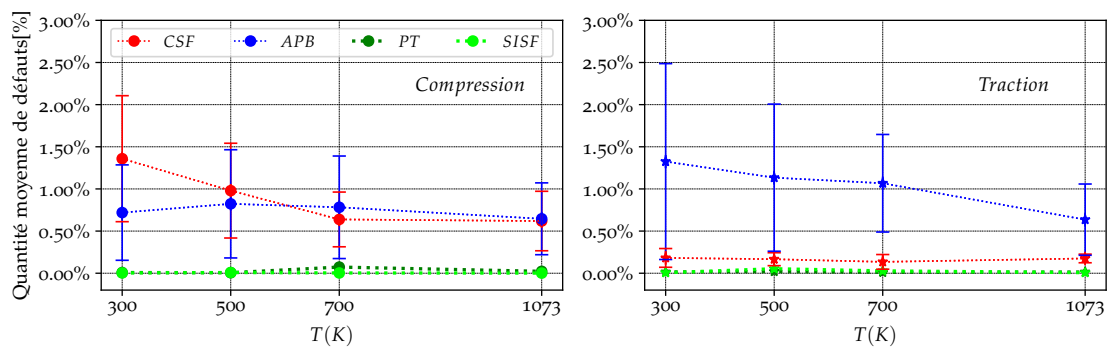


FIGURE 4.22 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K, 500K, 700K et 1073K : évolution des quantités moyennes de défauts dans le précipité lors des sollicitations en compression et en traction (les barres d'erreur représentent les écarts types sur les moyennes calculées).

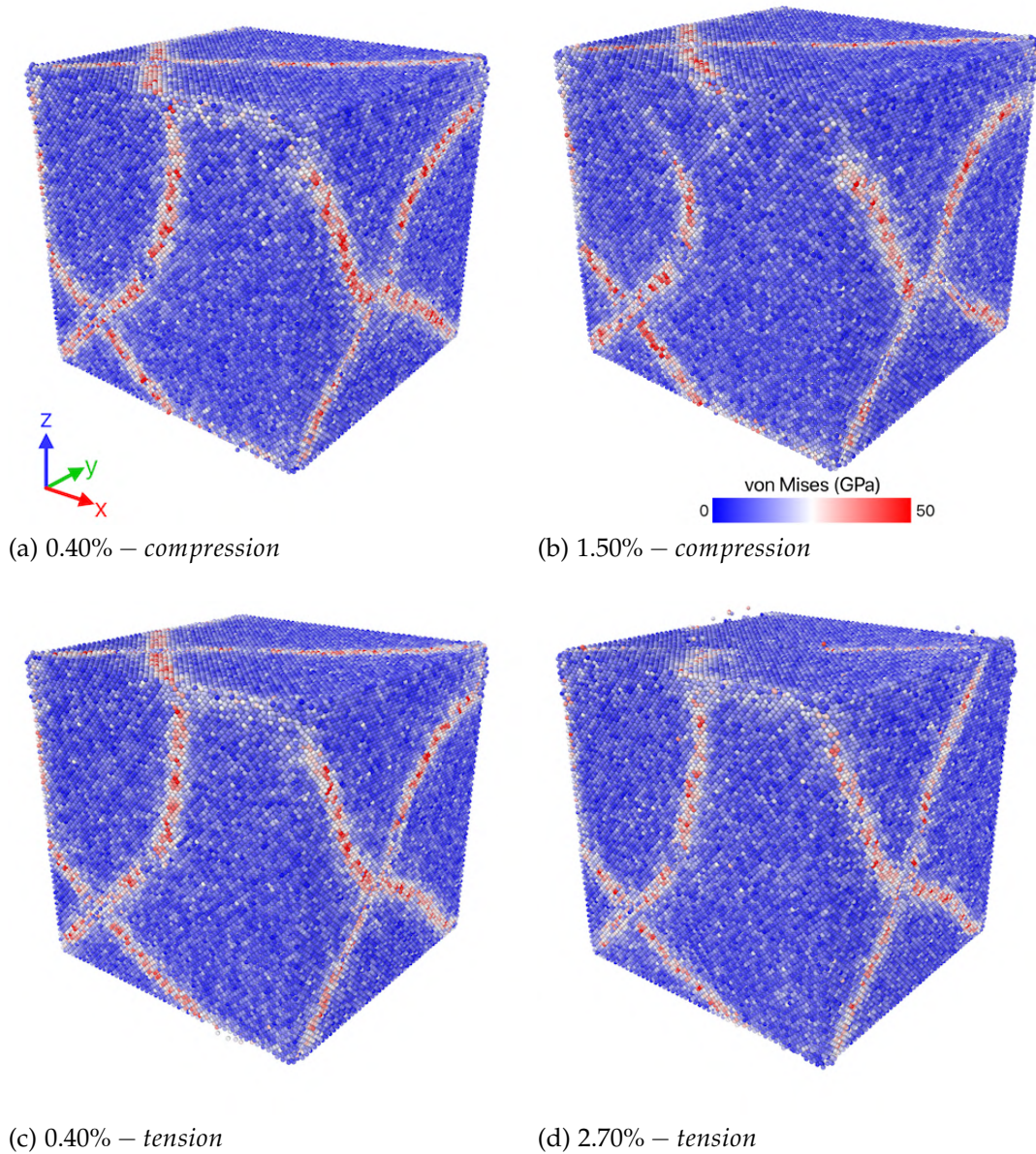


FIGURE 4.23 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K : distribution de la contrainte de von Mises en surface du précipité Ni_3Al pendant les chargements élastique et plastique en compression et en traction.

dans la matrice que de cisailer le précipité, les dislocations qui se trouvent dans les deux faces perpendiculaires à l'axe de sollicitation pilotent les premiers événements plastiques en traction.

Réciproquement en compression, les dislocations résidant dans les deux faces perpendiculaires à l'axe de sollicitation sont poussées vers le précipité tandis que celles qui se situent dans les quatre faces parallèles à l'axe de sollicitation sont libres de se déplacer au niveau de l'interface ou dans la matrice. Pour les mêmes raisons soulignées en traction (différence de propriété entre la matrice et le précipité), le mécanisme de plasticité au début du chargement est piloté par les dislocations se trouvant dans les quatre faces parallèles à l'axe de sollicitation. Du fait de la forme cubique du précipité, quatre faces sont parallèles à l'axe de sollicitation tandis que seulement deux faces lui sont perpendiculaires. Autrement dit, la quantité de dislocations mise en mouvement est plus importante en compression qu'en traction. De plus, la concentration de contrainte est plus importante en compression qu'en traction du fait de la localisation de la contrainte dans les endroits où résident les dislocations de misfit permettant d'accommoder les contraintes de misfit. En conséquence, la limite d'élasticité est plus élevée en traction qu'en compression.

Cependant, il a été observé une diminution de cette asymétrie sur la limite d'élasticité liée à l'augmentation de la température. Ce résultat crée un doute sur la dépendance totale de cette asymétrie aux différences de propriétés entre les phases ($\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$) soutenues dans le paragraphe précédent. En effet, même si une évolution des dislocations de misfit sous l'effet de la température est observée, la densité de dislocations reste supérieure dans les faces parallèles à l'axe de sollicitation comparativement aux autres faces qui lui sont perpendiculaires. De même, il n'y a qu'une très faible variation de la fraction volumique du précipité avec l'augmentation de la température (Figure 4.7). De ce fait, cette diminution de l'asymétrie pourrait être liée en partie à un autre paramètre qui serait dépendant de la température. Il est admis que les dislocations de misfit proviennent de la différence de paramètre de maille entre le précipité et la matrice qui peut être caractérisée par le paramètre de misfit δ donné par l'équation 4.1. La Figure 4.18 montre l'évolution des paramètres de maille du précipité et de la matrice en fonction de la température. En effet sous l'influence de la température, le système se dilate, ce qui conduit à une variation des paramètres de maille et donc du paramètre de misfit. La Figure 4.17, montre que plus la température augmente, plus ce paramètre de misfit diminue. La distribution des contraintes de cisaillement (σ_{xy} , σ_{xz} et σ_{yz}) à température ambiante (300K) et à une température de 1073K est aussi indiquée à la Figure 4.24. Avec l'augmentation de la température, la diminution du paramètre de misfit s'accompagne alors d'une évolution de la densité de dislocations

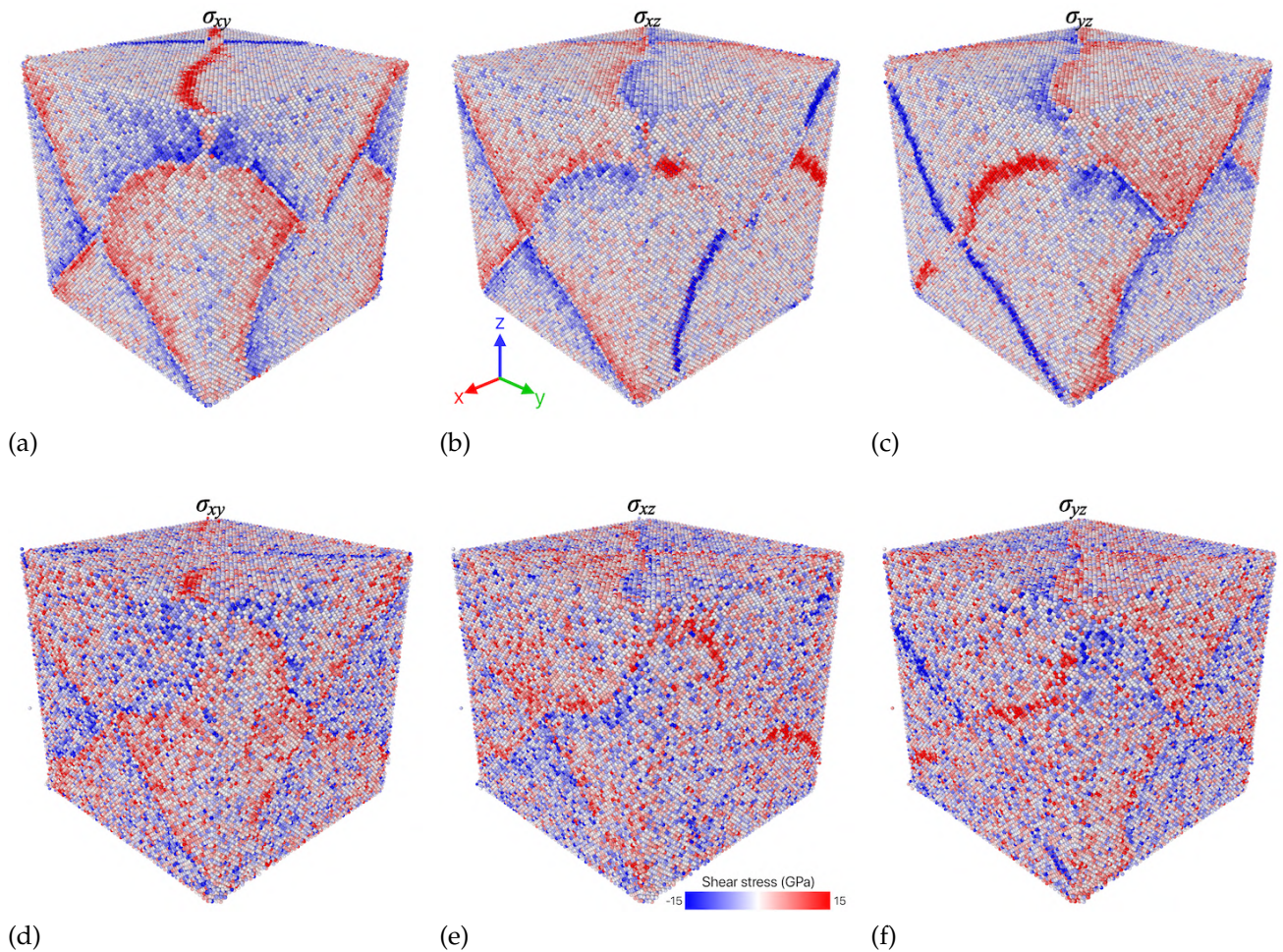


FIGURE 4.24 – Distribution des contraintes de cisaillement (σ_{xy} , σ_{xz} et σ_{yz}) au niveau de l'interface entre les phases $\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ après les étapes thermalisation à 300K (a, b et c) et 1073K (d, e et f). Pour plus de visibilité la phase $\gamma\text{-Ni}$ est supprimée. Seul le précipité $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ et l'interface sont montrés.

de misfit qui se caractérise par un effet de relaxation entraînant une diminution de la concentration de contraintes au niveau de l'interface. Par conséquent, cette diminution de la discontinuité au niveau de l'interface sous l'impact de la température, caractérisée par une diminution du paramètre de misfit entraîne la diminution de l'asymétrie.

Une asymétrie en traction/compression sur la résistance mécanique (contrainte maximale atteinte dans la phase plastique) est aussi mise en évidence dans ce travail. La Figure 4.17 donne l'évolution de cette asymétrie représentée par le ratio R_T/R_C en fonction de la température. Nos calculs ont montré que si cette asymétrie diminue en passant d'une valeur de 1.47 à une valeur de 1.18 pour une variation de température allant de 300K à 700K, elle augmente ensuite en passant d'une valeur de 1.18 à 1.36 lorsque la température passe de 700K à 1073K. Pour une variation de température allant de 300K à 700K, la diminution de résistance mécanique enregistrée en traction est plus importante que celle enregistrée en compression. La résistance mécanique en traction passe d'une valeur de 4.41GPa à une valeur de 2.95GPa (soit une diminution de 1.46GPa) alors que celle en compression passe d'une valeur de 3GPa à une valeur de 2.50GPa (soit une diminution de seulement 0.5GPa). En se basant sur l'évolution des quantités moyennes de défauts en fonction de la température (Figure 4.22), pour une variation de température allant de 300K à 700K, il apparaît une diminution plus importante de CSF en compression qu'en traction. Cette diminution de CSF est due à une diminution de l'activité des dislocations individuelles dans le précipité. C'est la raison pour laquelle, on note une légère augmentation de la quantité moyenne d' APB en compression. Cette diminution de l'activité des dislocations plus importante en compression qu'en traction se traduit par une diminution moins importante de la résistance mécanique en compression qu'en traction, d'où une diminution de l'asymétrie. Pour une variation de température allant de 700K à 1073K, une augmentation de l'asymétrie sur la résistance mécanique est observée. Ceci s'explique par le fait que la diminution de l'activité des dislocations observées pour cet intervalle de température est plus importante en traction qu'en compression. Ce phénomène se caractérise notamment une diminution de la quantité moyenne d' APB plus importante en traction qu'en compression (Figure 4.22), ce qui explique l'augmentation de la résistance mécanique observée en traction (Figure 4.15) et donc de l'asymétrie.

Dans le cadre de cette étude, même si le mouvement des dislocations observé dans les différentes faces (dislocations parallèles à l'axe de sollicitation mises en mouvement en compression et dislocations perpendiculaires à l'axe de sollicitation mises en mouvement en traction) est cohérent avec le comportement mécanique observé (limite d'élasticité plus

importante en traction qu'en compression), dans les alliages à misfit positif, la tendance inverse est observée [Mughrabi, 2014]. Une discussion plus détaillée sur le mouvement des dislocations par rapport au signe du paramètre de misfit est présentée à la section D de l'annexe.

Comparé à son comportement mécanique lorsqu'il est isolé, le comportement mécanique du nano-cube de Ni_3Al , lorsqu'il est intégré dans une matrice de Ni est différent. En effet, si l'amorçage des mécanismes de plasticité est piloté par les propriétés de surface dans le cas où la nanoparticule est isolée, lorsqu'il est en interaction avec la matrice, les dislocations de misfit résultant de cette interaction, gouvernent les premiers événements plastiques. Lorsque le précipité est isolé, le début de la plasticité est entièrement piloté par du glissement de dislocations partielles de Shockley cisillant le précipité à partir de la surface de contact. Dans le cas où le précipité est intégré dans une matrice, les premiers phases du mécanisme de plasticité restent localisés au niveau de l'interface entre matrice et précipité. Ceci reste d'ailleurs vrai quelle que soit la température.

À la différence du nano-cube isolé de Ni_3Al , les types de défauts qui se forment majoritairement en fonction de la température, dans le cas du nano-cube de Ni_3Al , intégré dans une matrice de Ni , suivent les tendances ci-après.

- En compression, pour les températures de 300K et 500K, les *CSFs* formés sont plus importants au début de plasticité, mais la quantité d'*APB* formées pendant le chargement reste non négligeable, contrairement à la tendance observée dans le cas des nano-cubes isolés où la quantité d'*APB* formée est faible devant les quantités de *PT* et de *CSF*.

Pour une température de 700K, la quantité d'*APB* formées devient plus élevée que la quantité de *CSF* formées, alors que dans le cas des nano-cubes isolés, la quantité de *PT* formées reste plus élevées devant tous les autres défauts. Les quantités de *CSF* et d'*APB* formées sont similaires.

À une température de 1073K, les quantités de *CSF* et d'*APB* deviennent similaires, tandis qu'avec les précipités isolés, la quantité d'*APB* formées reste faible devant les quantités de *PT* et de *CSF*.

- En traction, quelle que soit la température, le mécanisme de plasticité reste gouverné par la formation d'*APB*, contrairement au comportement observé dans les nano-cubes isolés, dans lesquels le mécanisme de plasticité reste gouverné par la formation de *PT* et de *CSF* majoritairement.
- Quel que soit le sens de sollicitation, la quantité de *PT* formées reste très faible

devant les quantités de *CSF* et d'*APB*, tandis que la tendance inverse est observée dans le précipité isolé.

- En accord avec le mécanisme de plasticité observé dans les nano-cubes isolés, la quantité de *SISF* formées pour toutes les températures est très faible devant la quantité de *CSF*.

Néanmoins, les simulations ont aussi montré que la forme du précipité peut jouer un rôle important sur le comportement mécanique et particulièrement sur l'asymétrie en traction/compression observée sur la limite d'élasticité. En effet, les simulations montrent qu'à cause de la forme cubique du précipité, la quantité de dislocations mises en mouvement en compression, au début de la plasticité dans les quatre faces parallèles à l'axe de sollicitation, est plus importante que la quantité de dislocations mises en mouvement dans les deux autres faces perpendiculaires à l'axe de sollicitation. La géométrie de l'interface jouant un rôle majeur, il devient nécessaire d'évaluer l'impact de la forme du précipité sur le comportement mécanique et particulièrement sur l'asymétrie en traction/compression observée sur la limite d'élasticité.

La fraction volumique a aussi un effet important sur le comportement mécanique des superalliages base nickel [Murakumo et al., 2004, Lapin et al., 2009]. Dans le cadre de cette étude, une variation significative de la fraction volumique n'est pas observée avec l'augmentation de la température. Cependant, il semble nécessaire d'étudier son impact sur le comportement mécanique et particulièrement sur l'asymétrie en traction/compression observée sur la limite d'élasticité.

L'étude de l'influence de ces deux caractéristiques constitue l'objet du chapitre 5.

CONCLUSION

Résultats par rapport à la littérature

L'objectif ici n'est pas de faire une confrontation directe entre les résultats obtenus dans le cadre de cette étude et ceux obtenus expérimentalement : les conditions de simulation appliquées ici sont trop différentes de celles utilisées expérimentalement. Mais le but est plutôt de voir si des tendances similaires à celles observées expérimentalement sont obtenues, malgré les fortes hypothèses fixées dans le cadre de cette étude.

Dans cette partie, le comportement mécanique d'un système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni} - \gamma'/\gamma$ contenant des renforts de forme cubique occupant une fraction volumique d'environ 50% a été étudié à différentes températures (300K, 500K, 700K et 1073K). Les simulations ont permis de révéler le rôle clé joué par l'interface entre les phases $\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ à travers les différences de propriétés, les contraintes et les dislocations de misfit ainsi que leur évolution en fonction de la température.

Indépendamment du sens de sollicitation, une diminution du module et de la limite d'élasticité a été observée avec l'augmentation de la température. Cette dépendance du comportement par rapport à la température a été attribuée à l'évolution des densités de dislocations de misfit entre les phases $\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ sous l'effet de la température. Expérimentalement, des tendances similaires sont aussi observées [Davies and Stoloff, 1965]. Les tests de traction et de compression effectués à différentes températures mettent en évidence l'existence d'une asymétrie traction/compression sur la limite d'élasticité qui diminue avec l'augmentation de la température. Cette asymétrie traction/compression observée sur la limite d'élasticité a été attribuée à deux aspects :

- la quantité de dislocations mise en mouvement est plus élevée en compression qu'en traction du fait de la forme du précipité ;
- l'impact du paramètre de misfit résultant de la différence entre les paramètres de maille du précipité et de la matrice.

La diminution de la valeur du paramètre de misfit en fonction de la température s'accompagne d'un effet de relaxation, qui conduit à une diminution de la concentration de contraintes au niveau de l'interface. Ceci se manifeste par une augmentation de la densité des dislocations ainsi qu'une diminution de l'asymétrie.

Des études ont montré que le signe et l'amplitude du misfit constituent des paramètres importants qui influent sur le comportement mécanique des superalliages [Osawa et al., 2004, Zhang et al., 2010, Mughrabi, 2014]. Dans cette étude, le misfit obtenu avec le potentiel de

[Du et al., 2012] est un misfit positif qui diminue avec l'augmentation de la température. Dans le cas d'autres superalliages utilisés pour la fabrication des aubes de turbines [Neumeier et al., 2021, Siebörger et al., 2001], un misfit négatif peut être présent. Dans ce cas, il devient le plus souvent de plus en plus négatif (plus élevé en valeur absolue) avec l'augmentation de la température, sauf au voisinage de la température de dissolution des précipités (solvus γ') [Neumeier et al., 2021, Mughrabi, 2014, Huang et al., 2018]. D'autres superalliages base nickel tels que le SC16 [Völkl et al., 1998] de même que certains alliages base cobalt [Sato et al., 2006, Mughrabi, 2014, Pyczak et al., 2015] peuvent présenter des misfit positifs. Dans ce cas, un misfit qui diminue avec l'augmentation de la température est observé [Neumeier et al., 2021, Mughrabi, 2014].

La caractérisation de l'évolution des quantités moyennes de défauts en fonction de la température a permis de comprendre l'évolution de l'asymétrie traction/compression observée sur la résistance mécanique de la microstructure considérée selon la direction de sollicitation [001].

Les résultats obtenus soulignent le rôle important joué par l'interface dans le comportement mécanique des nanoparticules lorsqu'elles sont intégrées dans une matrice, comparé à leur comportement lorsqu'elles sont isolées, aussi bien sur l'amorçage des premiers événements plastiques que sur les types de défauts formés.

Ce qu'il faut retenir

Par rapport aux résultats présentés dans ce chapitre, on peut retenir que :

- l'interface joue un rôle capital dans le comportement mécanique des systèmes Ni₃Al/Ni - γ'/γ , surtout au début de la plasticité ;
- la concentration de contraintes au niveau de l'interface est localisée dans les endroits où se forment les dislocations de misfit ;
- la densité de dislocations de misfit augmente avec l'accroissement de la température ;
- le module et la limite d'élasticité diminuent quand la température augmente, du fait de l'augmentation de la densité de dislocations de misfit ;
- les premiers événements plastiques sont pilotés par les dislocations de misfit ;
- en compression, les dislocations de misfit résidant dans les quatre faces parallèles à l'axe de sollicitation dirigent les premiers événements plastiques, alors qu'en traction, celles résidant dans les deux faces perpendiculaires à l'axe de sollicitation sont mises en mouvement ;

- la quantité de dislocations mises en mouvement est plus importante en compression qu'en traction du fait de la forme cubique du précipité;
- quand la température augmente, la concentration de contraintes au niveau de l'interface diminue;
- l'asymétrie traction/compression observée sur la limite d'élasticité diminue avec l'augmentation de la température du fait de la diminution des contraintes de misfit;
- la quantité totale de défauts diminue avec l'accroissement de la température du fait de la diminution de l'activité des dislocations dans le précipité.

INFLUENCE DE LA MORPHOLOGIE ET DE LA FRACTION VOLUMIQUE DES PRÉCIPITÉS SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES SYSTÈMES γ' / γ - Ni_3Al/Ni

SOMMAIRE

IMPACT DE LA MORPHOLOGIE DES PRÉCIPITÉS SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES SYSTÈMES $Ni_3Al/Ni - \gamma/\gamma'$	184
Influence de la morphologie des précipités sur le comportement mécanique à température ambiante	184
Influence de la morphologie des précipités sur le comportement mécanique à hautes températures	190
EFFET DE LA FRACTION VOLUMIQUE DES RENFORTS DE FORME CUBIQUE SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES SYSTÈMES γ'/γ - Ni_3Al/Ni	195
Comportement mécanique	197
Mécanismes de plasticité	201
INFLUENCE DE LA FRACTION VOLUMIQUE DES RENFORTS DE FORME CUBIQUE ARRONDIE SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES SYSTÈMES γ'/γ - Ni_3Al/Ni	203
Comportement mécanique	203
Mécanismes de plasticité	206
DISCUSSION	210
Effet de la forme sur le comportement mécanique	210

Impact de la fraction volumique des renforts de forme cubique sur le comportement mécanique	215
Impact de la fraction volumique des renforts de forme cubique arrondie sur le comportement mécanique	217
CONCLUSION DU CHAPITRE	219
Résultats par rapport à la littérature	219
Ce qu'il faut retenir	220

=====

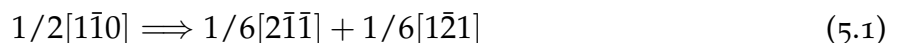
DANS ce chapitre, sont étudiés et discutés les effets de la morphologie et de la fraction volumique des précipités sur le comportement mécanique des systèmes $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$, et particulièrement sur l'asymétrie traction/compression observée sur la limite d'élasticité des microstructures contenant des renforts de forme cubique. Des tests de traction et de compression sont effectués à différentes températures. Les résultats sont analysés en prenant en compte l'évolution des contraintes et des dislocations de misfit en fonction de la forme et de la fraction volumique.

IMPACT DE LA MORPHOLOGIE DES PRÉCIPITÉS SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES SYSTÈMES Ni₃Al/Ni - γ/γ'

Les précipités présents dans les superalliages base nickel, peuvent avoir différentes formes (cubique, cubique arrondie, sphérique ...) selon la valeur du désaccord paramétrique de maille γ/γ' ([Van Sluytman and Pollock, 2012, Goodfellow et al., 2018, Neumeier et al., 2021, Lu et al., 2022]). Les simulations précédentes ont montré que la forme cubique du précipité joue un rôle important dans l'asymétrie traction/compression observée sur les microstructures contenant des renforts de forme cubique. Dans le cadre de cette thèse, l'étude de l'effet de la forme est conduite en considérant des renforts de forme cubique arrondie. L'arrondissement des cubes est obtenu en utilisant la méthodologie présentée à la section 3 du chapitre 3. Deux coefficients d'arrondissement ($\alpha = 0.20$ et $\alpha = 0.45$) ont été fixés pour étudier l'impact de l'arrondissement des arêtes et des coins des renforts sur le comportement mécanique du système étudié. Pour éviter une diminution significative de la fraction volumique lors de l'arrondissement du précipité, la taille du précipité est ajustée afin de garder des fractions volumiques similaires. Les fractions volumiques obtenues après l'arrondissement sont d'environ 48% et 50% respectivement pour les coefficients d'arrondissements de 0.20 et 0.45. Les mêmes méthodes de minimisation et de thermalisation que celles utilisées sur les microstructures contenant des précipités de forme cubique (cf. section 4 du chapitre 4) ont été appliquées sur celles ayant des précipités de forme cubique arrondie.

Influence de la morphologie des précipités sur le comportement mécanique à température ambiante

Les structures de dislocations de misfit obtenues après les étapes de minimisation et de thermalisation pour les différents coefficients d'arrondissement fixés sont présentées à la Figure 5.1. Contrairement à la structure de dislocations obtenue avec des renforts de forme cubique, il est observé dans le cas des formes cubiques arrondies, des dissociations de dislocations de type $1/2 \langle 110 \rangle$ au niveau des coins pour donner des dislocations super-partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$. Un exemple typique de mécanisme de dissociation est le suivant :



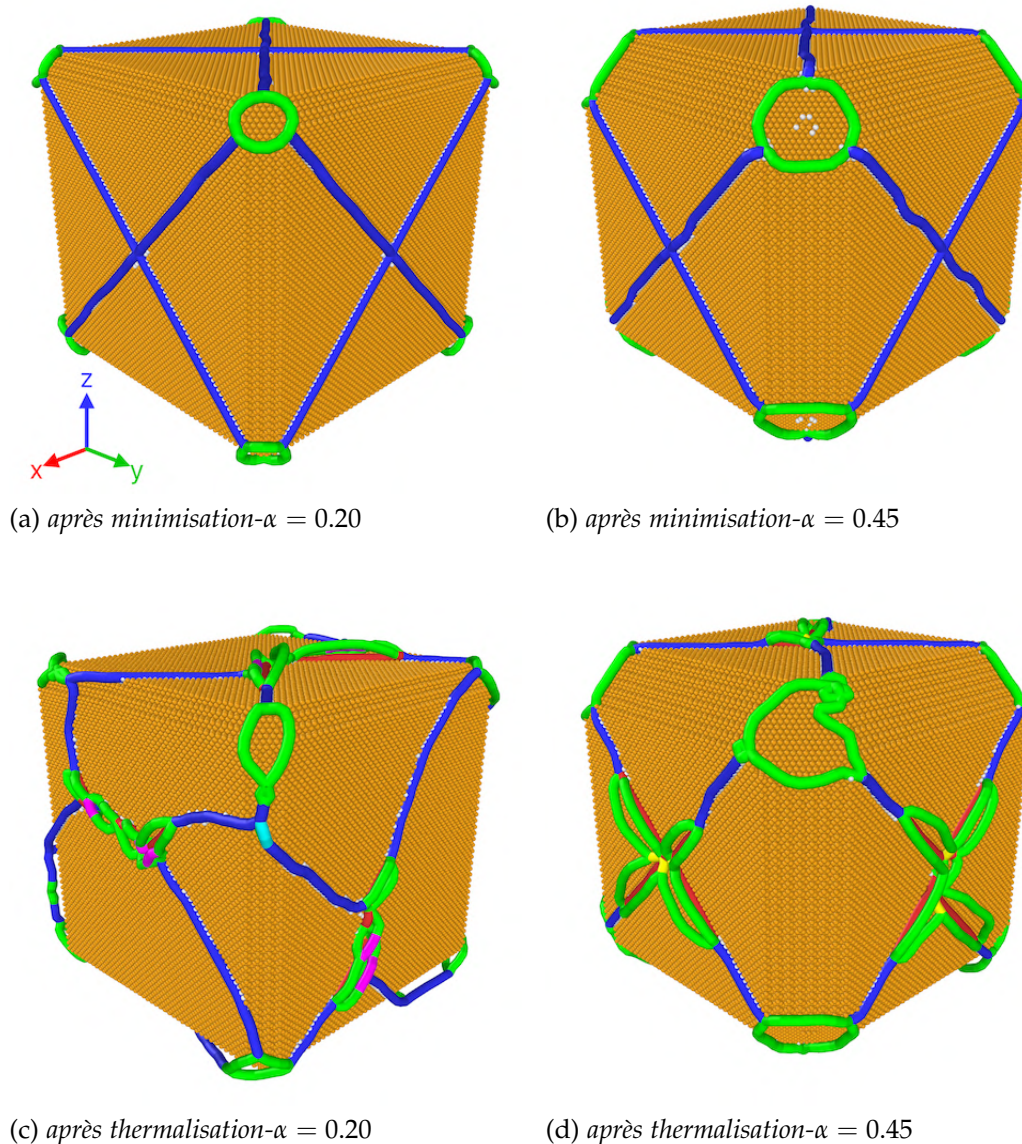


FIGURE 5.1 – Structure de dislocations de misfit obtenue entre les phases $\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ après l'étape de minimisation (a et b) et de thermalisation (c et d) à 300K pour des coefficients d'arrondissement de 0.20 et 0.45 (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).

300K	$E(\text{GPa})$	$Y_T(\text{GPa})$	$Y_C(\text{GPa})$	Y_T/Y_C	$R_T(\text{GPa})$	$R_C(\text{GPa})$	R_T/R_C
$\alpha = 0.00$	125	3.01	1.00	3.01	4.41	3.00	1.47
$\alpha = 0.20$	125	1.85	1.00	1.85	3.60	2.75	1.31
$\alpha = 0.45$	125	1.65	1.00	1.65	3.60	3.10	1.16

TABLE 5.1 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K : valeurs du module d'élasticité $E(\text{GPa})$ qui est le même en traction et en compression, des limites d'élasticité $Y_T(\text{GPa})$ et $Y_C(\text{GPa})$ (en traction et en compression respectivement), du ratio Y_T/Y_C représentant l'asymétrie sur la limite d'élasticité, des résistances mécaniques $R_T(\text{GPa})$ et $R_C(\text{GPa})$ (en traction et en compression respectivement) et du ratio R_T/R_C représentant l'asymétrie sur la résistance mécanique en fonction du coefficient d'arrondissement du précipité.

En comparant les intensités des énergies qui sont proportionnelles aux carrés des normes des vecteurs de Burgers, il apparaît que l'énergie diminue avec la dissociation des dislocations (équations 5.1). Ces observations sont en phase avec la littérature. En effet, [Prakash et al., 2015] ont montré que, dans les interfaces courbées, pour plus de stabilité, des dislocations ayant des vecteurs de Burgers de type $1/2 < 110 >$ peuvent se dissocier en partielles de Shockley ayant des vecteurs de Burgers de type $1/6 < 112 >$ selon le mécanisme de Frank [Hirth et al., 1983], contrairement aux interfaces planes où les dislocations ont du mal à se dissocier. Néanmoins, comme cela a été observé sur les microstructures contenant des renforts de forme cubique, il apparaît une déformation, ainsi que des dissociations supplémentaires sur les structures de dislocations de misfit, obtenues après l'étape de la thermalisation comparativement à celles obtenues après l'étape de minimisation.

Comportement mécanique

Les comportements mécaniques obtenus en effectuant des tests en compression et en traction sur les microstructures ayant des précipités de forme cubique arrondie, comparés à ceux obtenus avec les microstructures ayant des précipités de forme cubique, sont présentés à la Figure 5.2. Les comportements mécaniques des microstructures contenant des précipités de forme cubique sont reportés sur cette figure pour mieux comparer et quantifier les écarts.

Le tableau 5.1 montre les valeurs des propriétés mécaniques obtenues en traction et en compression, ainsi que les ratios représentant les asymétries sur la limite d'élasticité et sur la résistance mécanique en fonction de la forme du renfort. En compression, les comportements mécaniques obtenus montrent que les limites d'élasticité restent similaires quelle que soit la forme du renfort. En passant d'une forme cubique à une forme cubique arrondie avec un coefficient d'arrondissement de 0.20, il est constaté une diminution de la résistance

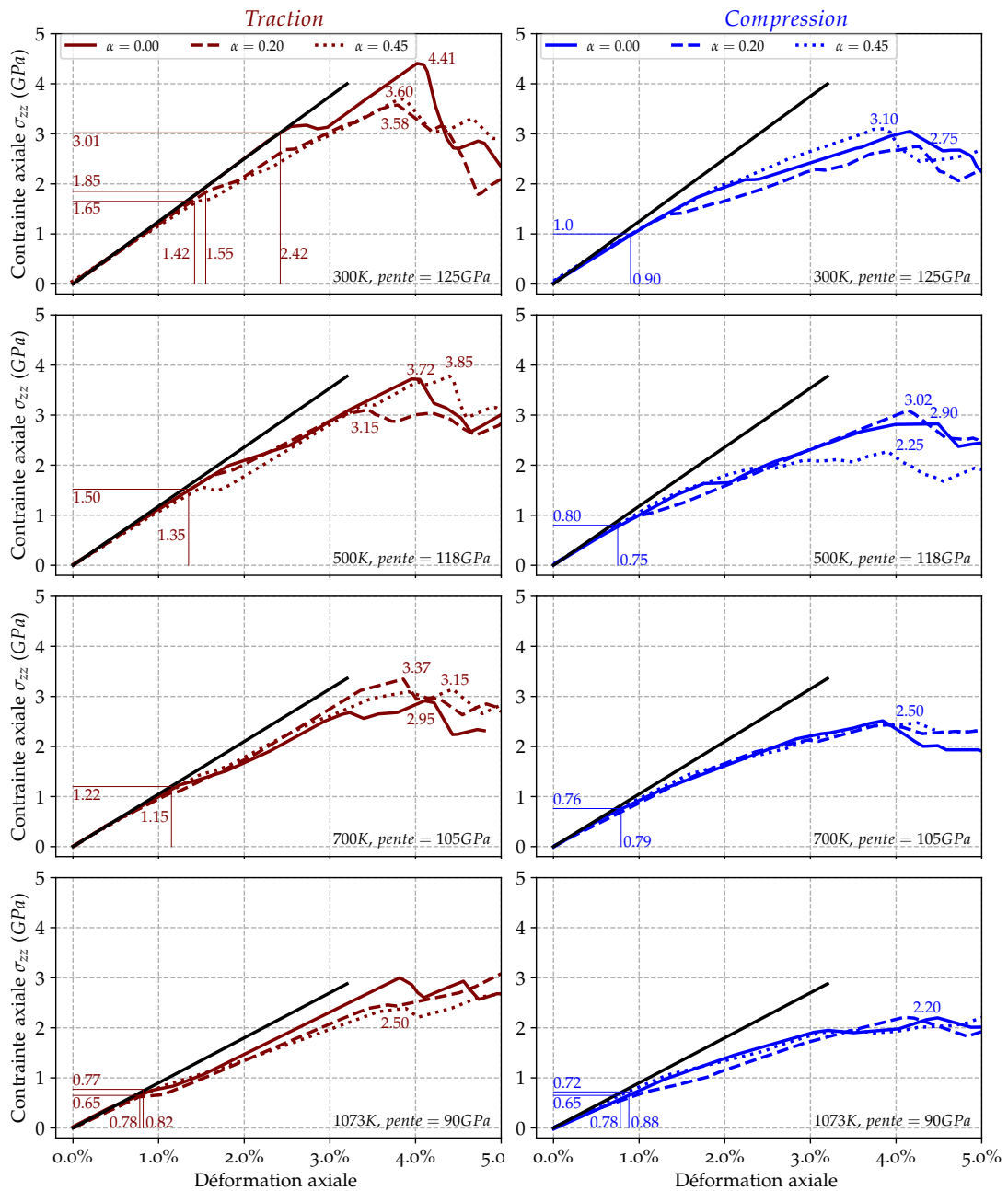


FIGURE 5.2 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K, 500K, 700K et 1073K : impact de l'arrondissement des précipités sur le comportement mécanique en compression et en traction.

mécanique. Cependant, lorsque le coefficient d'arrondissement augmente ensuite, en passant d'une valeur de 0.20 à une valeur de 0.45, la résistance mécanique augmente.

En traction, si les modules d'élasticité restent similaires quelle que soit la forme du renfort, la limite d'élasticité, de même que la résistance mécanique, diminue avec l'arrondissement des précipités. Néanmoins, les résistances mécaniques obtenues pour des coefficients d'arrondissement de 0.20 et 0.45 sont identiques.

En comparant les comportements mécaniques obtenus selon le sens de sollicitation, avec les microstructures ayant des renforts de forme cubique arrondie, des limites d'élasticité, ainsi que des résistances mécaniques, plus élevées en traction qu'en compression sont observées à température ambiante. Ceci révèle l'existence d'une asymétrie traction/compression générique pour cette famille de microstructures. L'évolution de l'asymétrie sur les limites d'élasticité (Y_T/Y_C) et sur la résistance mécanique (R_T/R_C) en fonction du coefficient d'arrondissement à température ambiante peut être observée au tableau 5.1. Il apparaît que les écarts entre les propriétés mécaniques en traction et en compression deviennent moins importants avec l'arrondissement des renforts. Autrement dit, l'asymétrie traction/compression observée avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique à température ambiante diminue avec l'arrondissement des renforts.

Mécanisme de plasticité

L'évolution des mécanismes de plasticité, au niveau de l'interface et dans le précipité, est étudiée pendant les chargements en traction et en compression, pour mieux comprendre les variations du comportement mécanique inhérentes à l'arrondissement du nano-renfort. La Figure 5.3 montre l'évolution des mécanismes de plasticité au niveau de l'interface au début de la sollicitation en compression et en traction. L'analyse de ces figures suggère des mécanismes similaires à ceux observés avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique. En effet, si en compression le début des mécanismes de plasticité est piloté par le mouvement des dislocations résidants dans les quatre faces parallèles à l'axe de sollicitation, en traction, le début des mécanismes de plasticité est plutôt gouverné par celles résidants au niveau des deux faces perpendiculaires à l'axe de chargement.

L'évolution des mécanismes de plasticité à l'intérieur des précipités arrondis reste similaire à celle obtenue avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique. Cependant, les quantités moyennes de défauts varient avec l'arrondissement des cubes. La Figure 5.4 montre l'évolution des quantités moyennes de défauts en fonction du coefficient d'arrondissement à température ambiante (300K). En compression, lorsque le coefficient d'arrondissement passe de 0.00 (cube) à 0.20 (cube arrondi), il se manifeste une diminu-

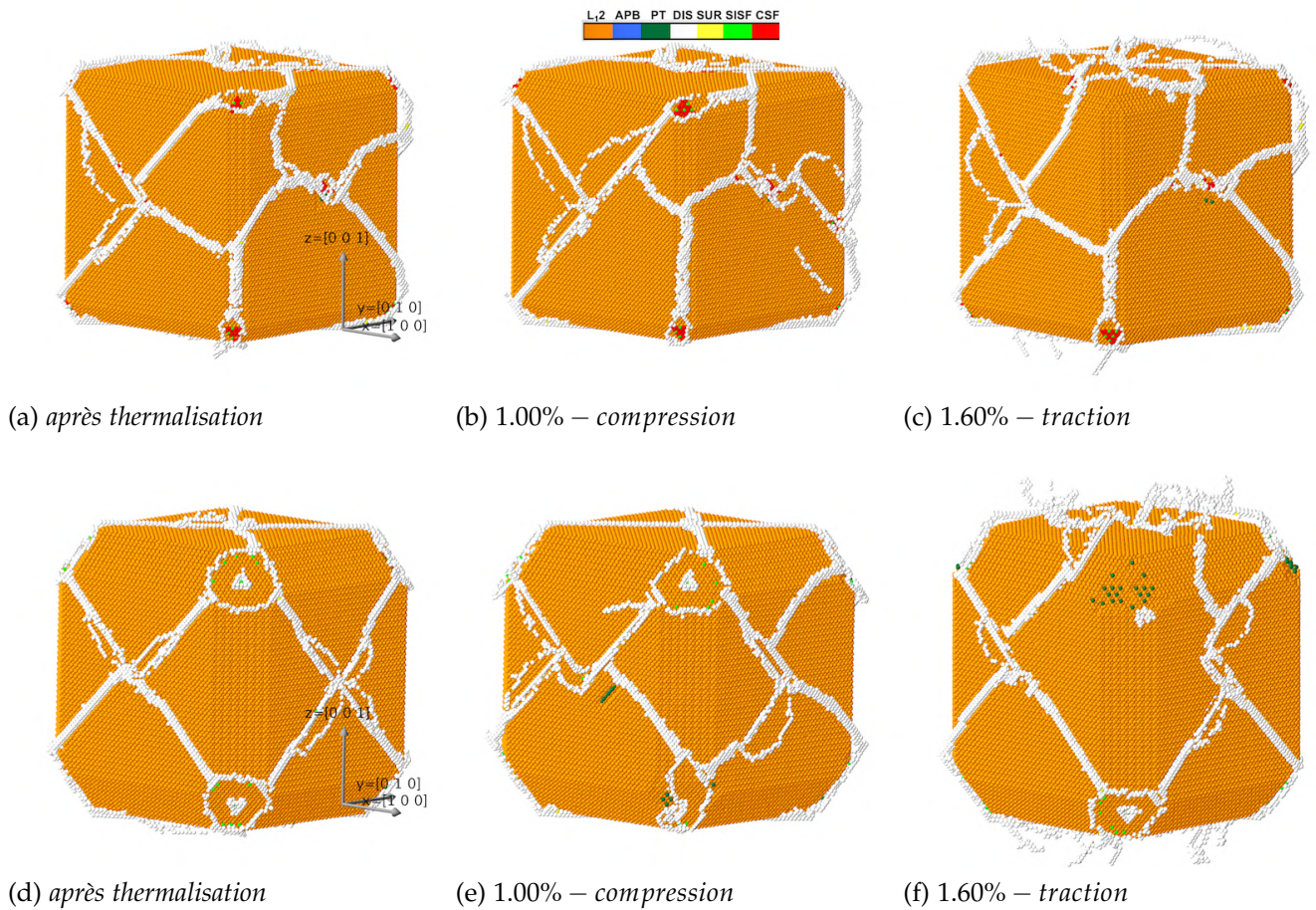


FIGURE 5.3 – Évolution des structures de dislocations de misfit à 300K dans les microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondi. (a, b et c)-Microstructure arrondie avec un coefficient d'arrondissement de 0.20, (d, e et f)-microstructure arrondie avec un coefficient d'arrondissement de 0.45. (a et d)-structures de dislocations de misfit après l'étape de la thermalisation, (b et e)-structures de dislocations de misfit au début de la compression et (c et f)-structures de dislocations de misfit au début de la traction.

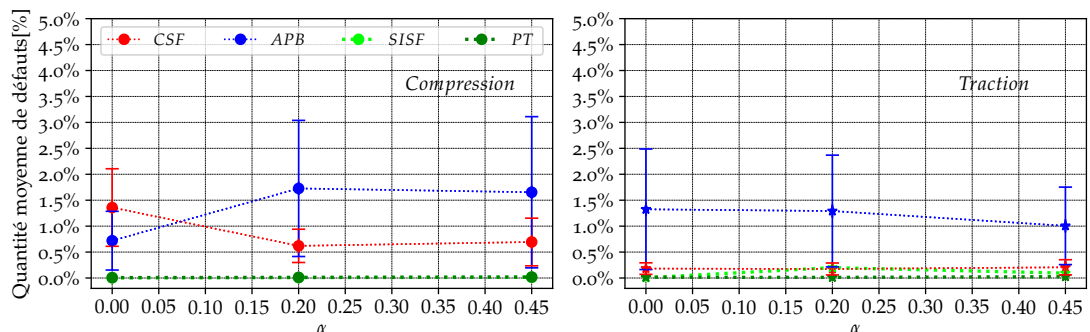


FIGURE 5.4 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K : évolution des quantités moyennes de défauts dans le précipité en fonction du coefficient d'arrondissement lors des tests de compression et de traction uni-axiales selon la direction $[001]$ (les barres d'erreurs représentent les écarts types calculés sur les moyennes).

tion de la quantité moyenne de *CSF* et une augmentation de la quantité moyenne d'*APB*. Lorsque le coefficient d'arrondissement augmente, en passant de 0.20 à 0.45, les quantités moyennes de *CSF* et d'*APB* restent similaires. Les quantités moyennes de *SISF* et de *PT* sont d'un même niveau et restent faibles devant les quantités de *CSF* et d'*APB* formées en compression, et ceci quelle que soit la forme du précipité.

En traction, les variations observées sont très faibles devant celles constatées en compression. Les quantités de *CSF* restent similaires quelle que soit la forme du précipité. Cependant, la quantité moyenne d'*APB* diminue un peu avec l'arrondissement des renforts. Les quantités moyennes de *SISF*, de *PT* et de *CSF* sont faibles devant la quantité moyenne d'*APB* formées.

En considérant les quantités moyennes de défauts formés selon le sens de sollicitation, avec l'arrondissement des renforts, des tendances inverses sont observées sur les quantités moyennes d'*APB* formées en traction et en compression. En effet, si la quantité moyenne d'*APB* formée est plus importante en traction qu'en compression pour des renforts cubiques, avec l'arrondissement des précipités, la quantité moyenne d'*APB* formée devient plus importante en compression qu'en traction. Néanmoins, les quantités moyennes de *CSF* formées restent supérieures en compression comparativement à la traction, et ceci quelle que soit la forme du précipité.

Il est à souligner que les variations des quantités moyennes de défauts en fonction de la forme sont inférieures à 3%. L'écart-type calculé augmente avec l'accroissement de la quantité moyenne de défaut.

Influence de la morphologie des précipités sur le comportement mécanique à hautes températures

Comportement mécanique

Le module et la limite d'élasticité diminuent avec l'augmentation de la température ; ce qui a été également observé sur des microstructures contenant des renforts de forme cubique. La Figure 5.2 montre l'évolution des comportements en traction et en compression selon la forme du renfort à 500K, 700K et 1073K. Les valeurs des propriétés mécaniques, issues des tests de traction et de compression, pour chaque température, sont recensées dans le tableau 5.2. L'analyse des comportements montre que les modules et limites d'élasticité observés restent très proches quelle que soit la forme du renfort. Les variations observées sur la résistance mécanique changent selon la température.

À 500K, en traction, la résistance mécanique diminue puis augmente, lorsque le coefficient

500K	$E(\text{GPa})$	$Y_T(\text{GPa})$	$Y_C(\text{GPa})$	Y_T/Y_C	$R_T(\text{GPa})$	$R_C(\text{GPa})$	R_T/R_C
$\alpha = 0.00$	118	1.50	0.80	1.875	3.72	2.90	1.28
$\alpha = 0.20$	118	1.50	0.80	1.875	3.15	3.02	1.04
$\alpha = 0.45$	118	1.50	0.80	1.875	3.85	2.25	1.71
700K	$E(\text{GPa})$	$Y_T(\text{GPa})$	$Y_C(\text{GPa})$	Y_T/Y_C	$R_T(\text{GPa})$	$R_C(\text{GPa})$	R_T/R_C
$\alpha = 0.00$	105	1.22	0.76	1.61	2.95	2.50	1.18
$\alpha = 0.20$	105	1.22	0.76	1.61	3.37	2.50	1.348
$\alpha = 0.45$	105	1.22	0.76	1.61	3.15	2.50	1.26
1073K	$E(\text{GPa})$	$Y_T(\text{GPa})$	$Y_C(\text{GPa})$	Y_T/Y_C	$R_T(\text{GPa})$	$R_C(\text{GPa})$	R_T/R_C
$\alpha = 0.00$	90	0.77	0.72	1.06	3.00	2.20	1.36
$\alpha = 0.20$	90	0.65	0.65	1.00	3.00	2.20	1.36
$\alpha = 0.45$	90	0.77	0.72	1.06	2.50	2.20	1.13

TABLE 5.2 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 500K, 700K et 1073K : valeurs du module d'élasticité $E(\text{GPa})$ (qui est le même en traction et en compression), des limites d'élasticité $Y_T(\text{GPa})$ et $Y_C(\text{GPa})$ (en traction et en compression respectivement), du ratio Y_T/Y_C représentant l'asymétrie sur la limite d'élasticité, des résistances mécaniques $R_T(\text{GPa})$ et $R_C(\text{GPa})$ (en traction et en compression respectivement) et du ratio R_T/R_C représentant l'asymétrie sur la résistance mécanique en fonction du coefficient d'arrondissement du précipité pour chaque température.

d'arrondissement passe de 0.00 à 0.20, puis de 0.20 à 0.45 respectivement. En compression, pour cette même gamme de variation, la tendance inverse à celle observée en traction, est constatée (la résistance mécanique augmente puis diminue).

À 700K, en traction, lorsque le coefficient d'arrondissement varie de 0.00 (cube) à 0.20 (cube arrondi), il est constaté une augmentation de la résistance mécanique. En compression, les résistances mécaniques trouvées restent similaires quelle que soit la forme du précipité.

À 1073K, en traction, les résistances mécaniques restent similaires lorsque le coefficient d'arrondissement passe de 0.00 à 0.20. En revanche, lorsque le coefficient d'arrondissement augmente en passant de 0.20 à 0.45, la résistance mécanique diminue. Des résistances mécaniques similaires sont observées en compression pour toutes les formes.

En considérant le sens de sollicitation, avec l'augmentation de la température, les tendances observées à température ambiante sur l'asymétrie traction/compression changent (tableau 5.1). En effet, à température ambiante, si l'asymétrie observée sur la limite d'élasticité diminue avec l'arrondissement des renforts, avec l'augmentation de la température (à partir de 500K), sa variation en fonction de la forme du précipité devient quasi-constante. Concernant l'asymétrie sur la résistance mécanique, différentes tendances sont observées selon la forme du précipité en fonction de la température (tableau 5.2).

L'analyse de l'asymétrie en fonction du coefficient d'arrondissement montre que la tem-

pérature à partir de laquelle on observe l'augmentation de l'asymétrie diminue avec l'arrondissement des renforts. Avec les coefficients d'arrondissement de 0.00, 0.20 et 0.45, les températures pour lesquelles l'augmentation de l'asymétrie est visible, sont respectivement 1073K, 700K et 500K (tableau 5.1).

Mécanismes de plasticité

Les mécanismes de plasticité observés sur des microstructures contenant des précipités de forme cubique arrondie à hautes températures restent similaires à ceux observés à température ambiante. Les structures de dislocations de misfit obtenues après les étapes de thermalisation à 500K, 700K et 1073K pour les coefficients d'arrondissement de 0.20 et 0.45 sont données à la Figure 5.5. Au début du chargement, le mouvement de ces dislocations de misfit, localisées au niveau de l'interface entre les phases $\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$, pilotent la plasticité. À l'intérieur du précipité, avec l'augmentation de la température, les quantités et les types de défauts formés varient. La Figure 5.6 montre l'évolution des quantités moyennes de défauts à 500K, 700K et 1073K à l'intérieur des précipités de forme cubique et cubique arrondie pour un taux de déformation variant de 0 à 5%.

À 500K, en compression, il apparaît une diminution de la quantité moyenne d'APB, pendant que la quantité moyenne de CSF varie peu, lorsque le coefficient d'arrondissement varie de 0.00 à 0.20. Si ce dernier passe de 0.20 à 0.45, la quantité moyenne d'APB augmente ensuite, alors que la quantité moyenne de CSF diminue. En traction, les quantités moyennes d'APB et de CSF restent similaires quelle que soit la forme du précipité.

À 700K, en compression, les quantités moyennes d'APB et de CSF augmentent légèrement, lorsque le coefficient d'arrondissement augmente de 0.00 à 0.20. La quantité moyenne d'APB continue d'augmenter, pendant que la quantité moyenne de CSF diminue, lorsque le coefficient d'arrondissement passe de 0.20 à 0.45. En traction, la quantité moyenne d'APB formées est similaire pour toutes les formes. Cependant, la quantité moyenne de CSF augmente légèrement, puis diminue, lorsque le coefficient d'arrondissement varie respectivement de 0.00 à 0.20 puis de 0.20 à 0.45.

À 1073K, en compression, la quantité moyenne d'APB augmente pendant que la quantité de CSF diminue, lorsque le coefficient d'arrondissement passe de 0.00 à 0.20. Lorsque ce dernier passe de 0.20 à 0.45, les quantités d'APB et de CSF formées restent inchangées. En traction, la quantité moyenne d'APB augmente légèrement, lorsque le coefficient d'arrondissement s'accroît. La quantité moyenne de CSF connaît une faible diminution avec l'arrondissement des renforts.

Pour toutes les températures, quelle que soit la forme du précipité, les quantités moyennes

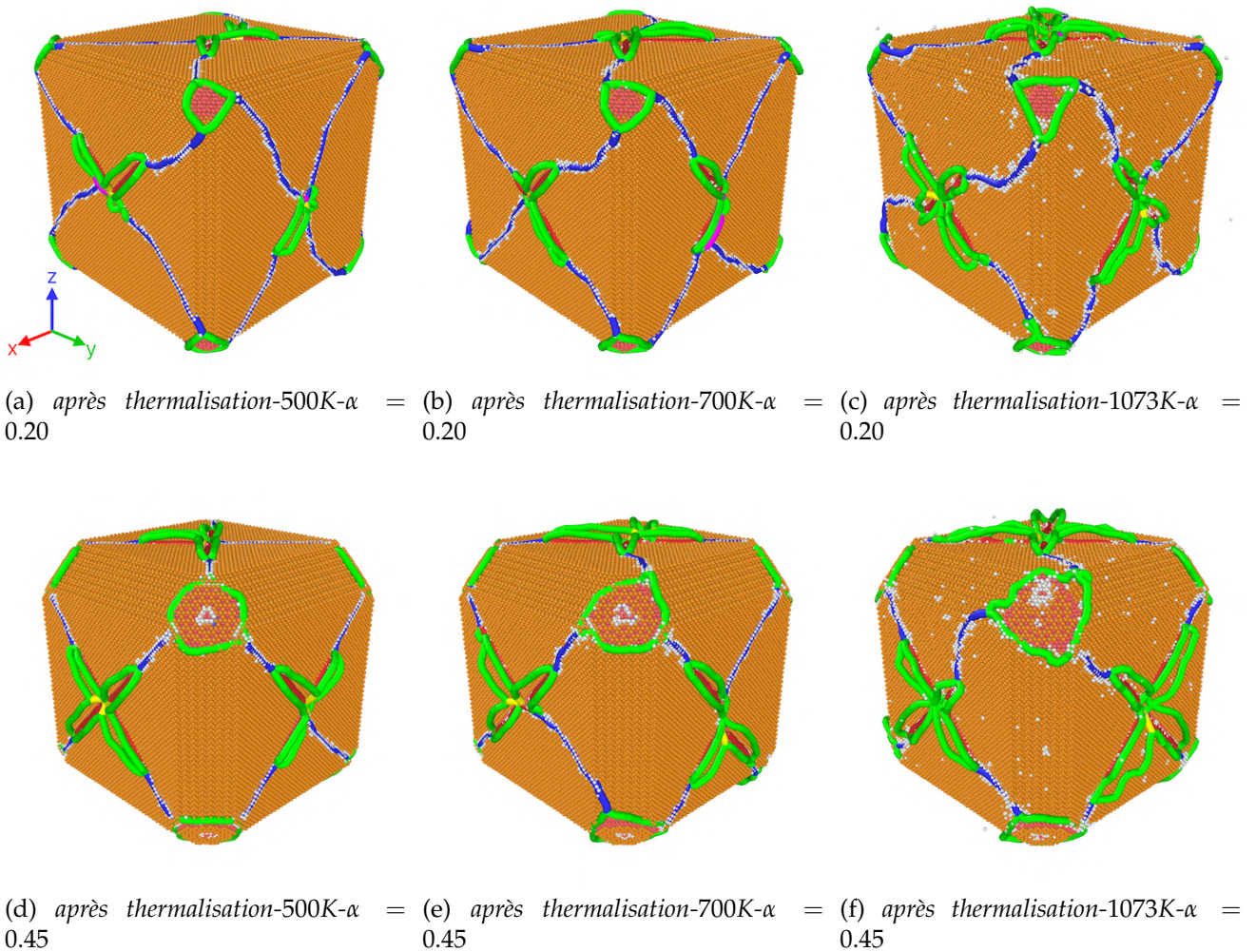


FIGURE 5.5 – Évolution des structures de dislocations de misfit avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie après thermalisation à 500K, 700K et 1073K (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations) pour les coefficients d'arrondissement de 0.20 (a, b et c) et 0.45 (d, e et f).

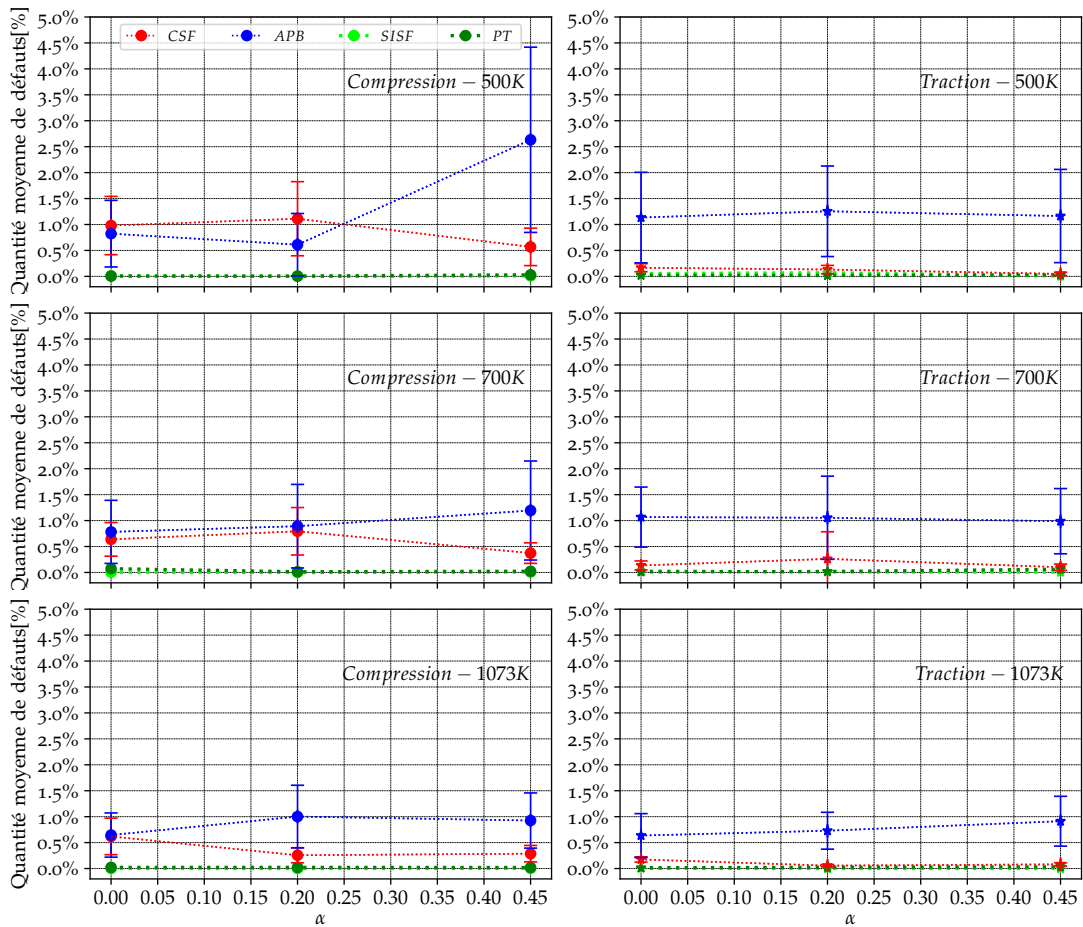


FIGURE 5.6 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 500K, 700K et 1073K : évolution des quantités moyennes de défauts dans le précipité en fonction du coefficient d'arrondissement lors des sollicitations en compression et en traction selon la direction $[001]$ (les barres d'erreurs représentent les écart-types calculés sur les moyennes).

de SISF et de PT restent faibles devant les quantités moyennes d'APB et de CSF formées.

Lors de l'arrondissement des renforts, des petites variations de fraction volumique ont été observées. Et même si, dans le cadre de cette étude, ces petites variations dues au changement de la forme ont été négligées, il reste intéressant d'étudier l'impact que la fraction volumique pourrait avoir sur le comportement mécanique, et ainsi élargir la compréhension de l'effet composite.

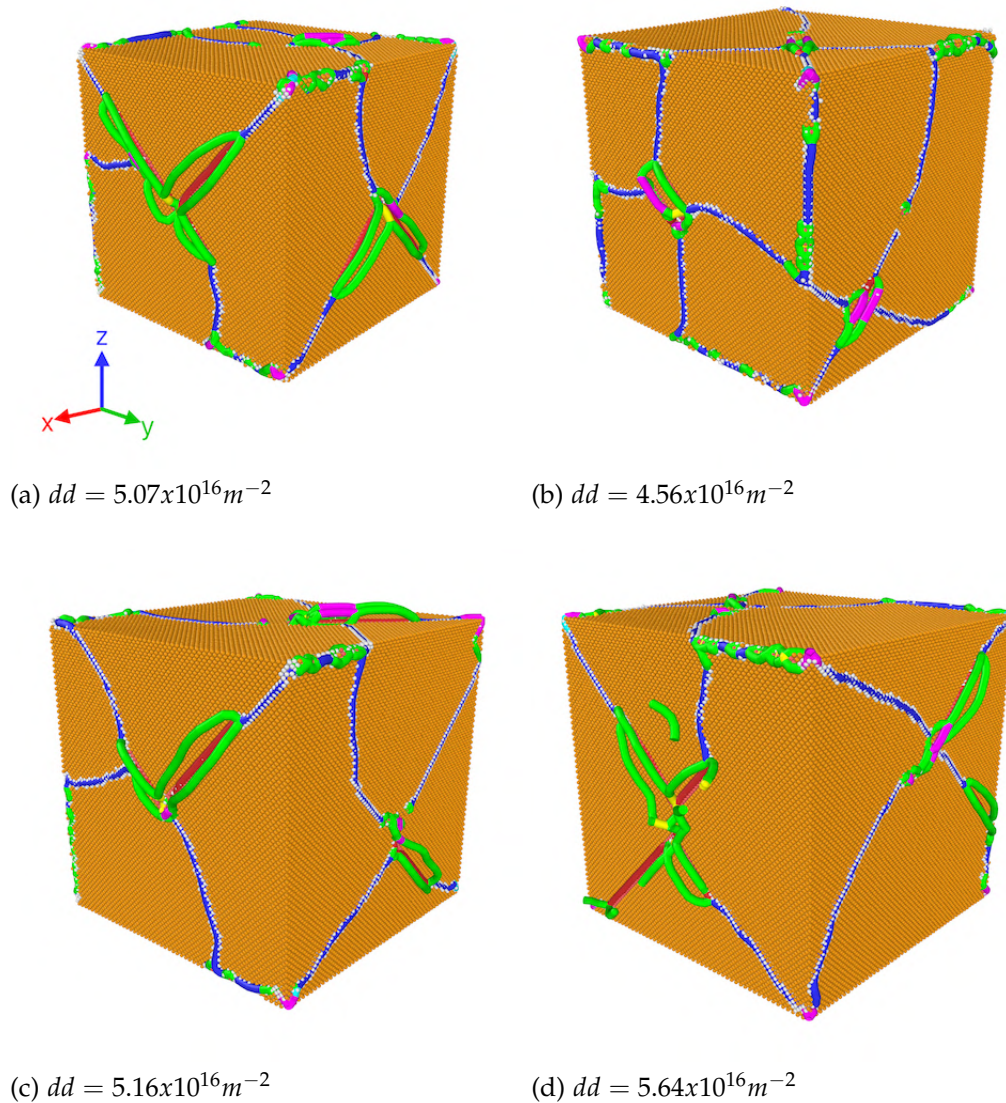


FIGURE 5.7 – Impact de la fraction volumique sur le comportement mécanique à 300K : évolution de la structure de dislocations de misfit obtenue après la thermalisation pour des microstructures contenant des renforts cubiques qui occupent des fractions volumiques de l'ordre de 38%-(a), 49%-(b) 56%-(c) et 63%-(d) (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).

EFFET DE LA FRACTION VOLUMIQUE DES RENFORTS DE FORME CUBIQUE SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES SYSTÈMES $\gamma' / \gamma\text{-Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$

Pour étudier l'impact de la fraction volumique (f_v) sur le comportement mécanique des systèmes $\gamma' / \gamma\text{-Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$, quatre microstructures de même taille contenant des pré-

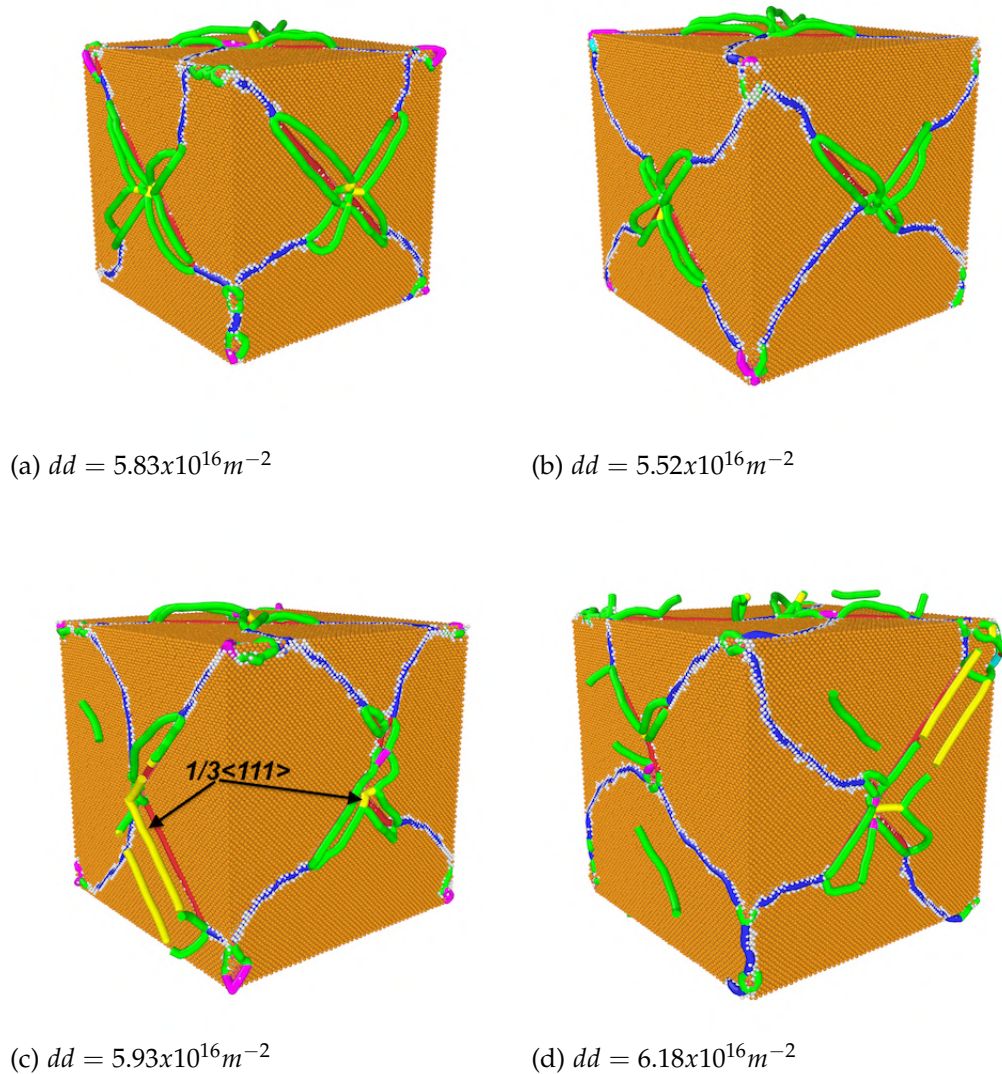


FIGURE 5.8 – Influence de la fraction volumique sur le comportement mécanique à 700K : évolution de la structure de dislocations de misfit obtenue après thermalisation pour des microstructures contenant des renforts cubiques qui occupent des fractions volumiques de l'ordre de 38%-(a), 49%-(b) 56%-(c) et 63%-(d) (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).

cipités de tailles différentes occupant des fractions volumiques de l'ordre de 38%, 49%, 56% et 63% ont été générées. Les mêmes méthodes de minimisation et de thermalisation que celles décrites précédemment (présentés à la section 4 du chapitre 4) ont été appliquées pour toutes les microstructures. Deux formes de renforts (cubique et cubique arrondi avec un coefficient d'arrondissement de 0.20) ont été considérées. Les études sont effectuées à température ambiante (300K) et à haute température (700K) afin d'étudier l'impact de la

fraction volumique à des températures différentes.

Les structures de dislocations de misfit obtenues après les étapes de thermalisation à 300K et à 700K, pour les différentes fractions volumiques considérées, sont montrées respectivement aux Figures 5.7 et 5.8. La forme et l'état de la structure de dislocations de misfit après l'étape de thermalisation varient avec la fraction volumique. Avec l'augmentation du volume du précipité, il est noté une augmentation de la quantité d'interfaces qui peut participer à l'augmentation de la densité de dislocations (dd) de misfit dans le volume total du système. Les densités de dislocations calculées pour chaque microstructure après l'étape de thermalisation, et qui dépendent à la fois de la quantité d'interface et de l'état de dissociation des structures de dislocations, varient avec la fraction volumique. Une augmentation de la densité de dislocations avec l'augmentation de la température est notée pour toutes les fractions volumiques.

Comportement mécanique

La Figure 5.9 présente l'évolution des comportements mécaniques en compression et en traction avec les différentes fractions volumiques fixées à température ambiante (300K). L'analyse des courbes indique que le comportement mécanique varie avec l'augmentation de la fraction volumique. Le tableau 5.3 rassemble les valeurs des propriétés mécaniques, en traction et en compression à température ambiante en fonction de la fraction volumique. En traction, même si le module d'élasticité reste constant, il est constaté une diminution de la limite d'élasticité avec l'augmentation de la fraction volumique. La résistance mécanique varie de façon non linéaire avec la fraction volumique.

En compression, le module d'élasticité reste inchangé quelle que soit la fraction volumique, tandis que la limite d'élasticité et la résistance mécanique varient. Plus précisément, lorsque la fraction volumique passe de 38% à 49%, la limite d'élasticité reste inchangée tandis que la résistance mécanique augmente. Si la fraction volumique est augmentée, il en résulte une diminution de la limite d'élasticité et de la résistance mécanique.

En comparant les comportements obtenus selon le sens de la sollicitation (Figure 5.9), il apparaît clairement que quelle que soit la fraction volumique considérée, la limite d'élasticité et la résistance mécanique ainsi que leurs variations sont plus importantes en traction qu'en compression, ce qui démontre le caractère général de l'asymétrie traction/compression sur la limite d'élasticité et sur la résistance mécanique (Figure 5.10). L'asymétrie sur la limite d'élasticité et sur la résistance mécanique varient non linéairement avec l'augmentation de la fraction volumique (tableau 5.3).

Lorsque la température augmente en passant de 300K à 700K, en considérant les mêmes

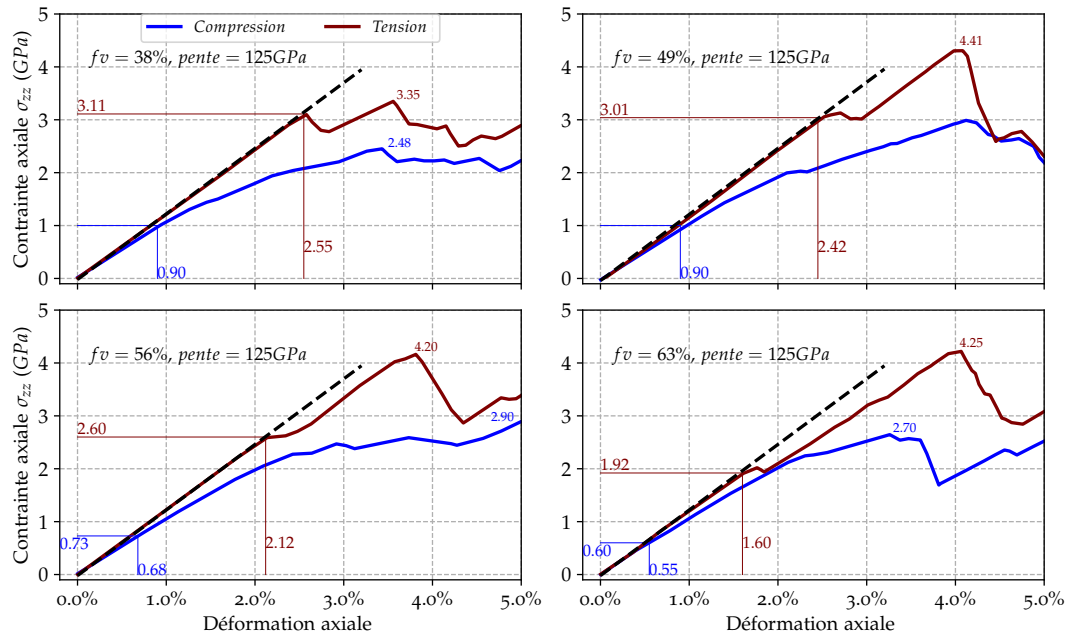


FIGURE 5.9 – Comportement mécanique à 300K : impact de la variation de la fraction volumique sur le comportement mécanique des microstructures contenant des renforts de forme cubique lors des tests de compression (bleue) et de traction (marron) uni-axiales selon la direction $[001]$.

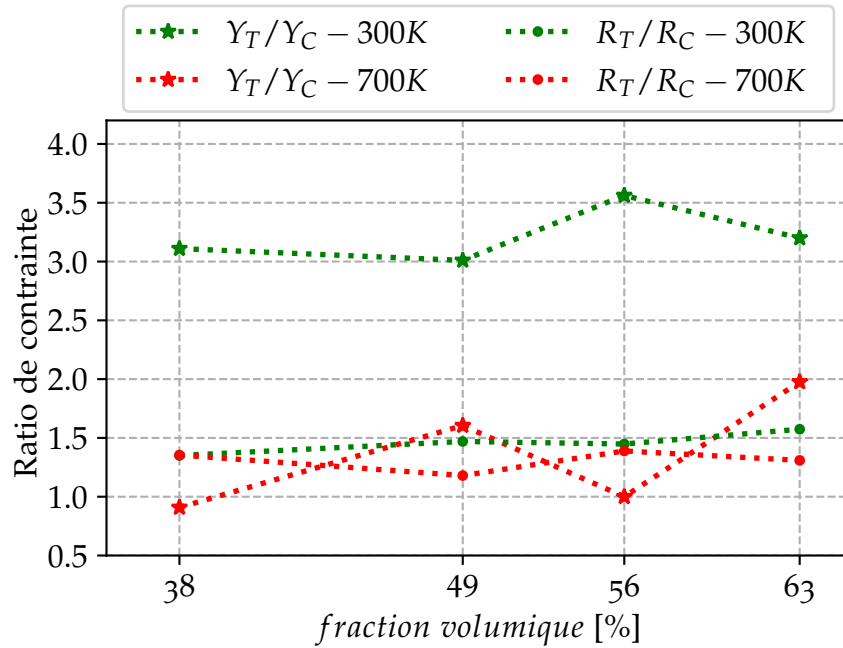


FIGURE 5.10 – Comportement mécanique des systèmes $\text{Ni}_3\text{Al/Ni}$ à 300K et à 700K : impact de la fraction volumique des renforts de forme cubique sur l'évolution de l'asymétrie en traction/compression observée sur la limite d'élasticité (Y_T/Y_C) et sur la résistance mécanique (R_T/R_C) à 300K et à 700K.

microstructures, des modifications sont observées sur le comportement mécanique pour les différentes fractions volumiques considérées. La Figure 5.11 présente les comportements

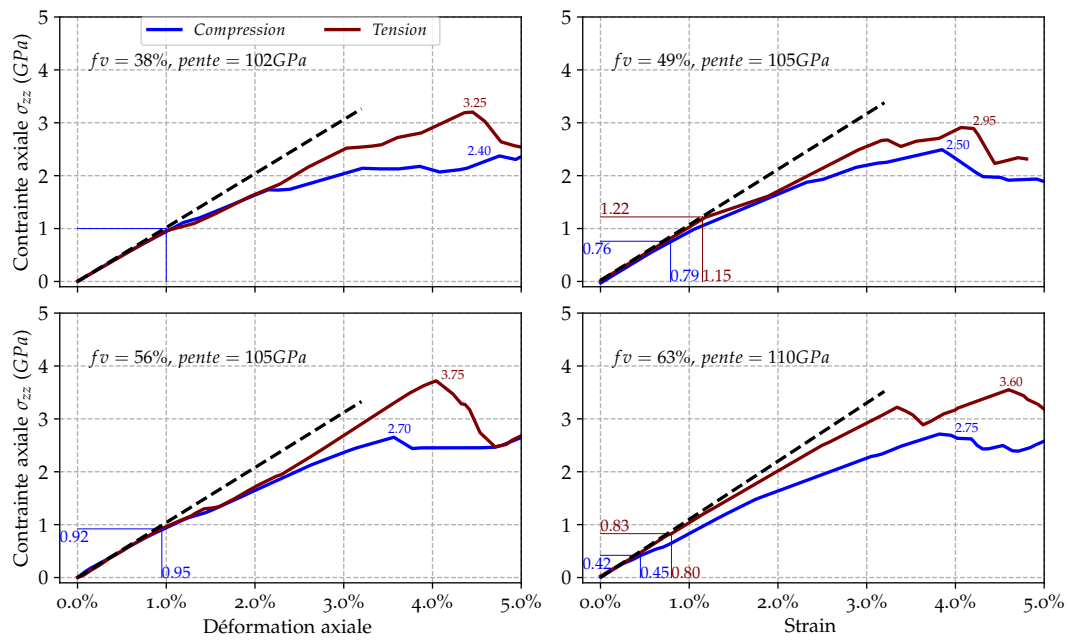


FIGURE 5.11 – Comportement mécanique à 700K : impact de la variation de la fraction volumique sur le comportement mécanique des microstructures contenant des renforts de forme cubique lors des tests de compression (bleue) et de traction (marron) selon la direction [001].

mécaniques obtenus en réalisant des tests de compression et de traction à 700K. Le tableau 5.3 indique les valeurs des propriétés mécaniques obtenues en fonction de la fraction volumique. Concernant le comportement élastique, contrairement à la tendance observée à température ambiante où le module d'élasticité reste constant quelle que soit la fraction volumique, à 700K, on note parfois une variation du module d'élasticité avec l'augmentation de la fraction volumique. Le module d'élasticité passe de 102GPa à 105GPa lorsque la fraction volumique passe de 38% à 49%, elle reste constante pour une variation de fraction volumique allant de 49% à 56% puis augmente à nouveau en passant de 105GPa à 110GPa lorsque la fraction volumique passe de 56% à 63%. Ceci conduit à un écart faible mais significatif de 8GPa.

Lorsque la température passe de 300K à 700K, en traction pour toutes les fractions volumiques, les limites d'élasticités et les résistances mécaniques diminuent (tableau 5.3). En compression, pour une fraction volumique de 38%, la limite d'élasticité reste la même, alors que la résistance mécanique connaît une petite diminution. Avec une fraction volumique de 49%, la limite d'élasticité et la résistance mécanique diminuent. Quand la fraction volumique est de 56%, la limite d'élasticité augmente un peu, pendant que la résistance mécanique connaît une faible diminution. Si la fraction volumique monte à 63%, la limite d'élasticité diminue un peu, alors que la résistance mécanique augmente légèrement.

300K	$E(\text{GPa})$	$Y_T(\text{GPa})$	$Y_C(\text{GPa})$	Y_T/Y_C	$R_T(\text{GPa})$	$R_C(\text{GPa})$	R_T/R_C
$fv = 38\%$	125	3.11	1.00	3.11	3.35	2.48	1.35
$fv = 49\%$	125	3.01	1.00	3.01	4.41	3.00	1.47
$fv = 56\%$	125	2.60	0.73	3.56	4.20	2.90	1.45
$fv = 63\%$	125	1.92	0.60	3.20	4.25	2.70	1.57
700K	$E(\text{GPa})$	$Y_T(\text{GPa})$	$Y_C(\text{GPa})$	Y_T/Y_C	$R_T(\text{GPa})$	$R_C(\text{GPa})$	R_T/R_C
$fv = 38\%$	102	1.00	1.00	1.00	3.25	2.40	1.35
$fv = 49\%$	105	1.22	0.76	1.60	2.95	2.50	1.18
$fv = 56\%$	105	0.92	0.92	1.00	3.75	2.70	1.39
$fv = 63\%$	110	0.83	0.42	1.98	3.60	2.75	1.31

TABLE 5.3 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K et 700K contenant des renforts de forme cubique : valeurs du module d'élasticité $E(\text{GPa})$ (qui est le même en traction et en compression), des limites d'élasticité $Y_T(\text{GPa})$ et $Y_C(\text{GPa})$ (en traction et en compression respectivement), du ratio Y_T/Y_C représentant l'asymétrie sur la limite d'élasticité, des résistances mécaniques $R_T(\text{GPa})$ et $R_C(\text{GPa})$ (en traction et en compression respectivement) et du ratio R_T/R_C représentant l'asymétrie sur la résistance mécanique en fonction de la fraction volumique du précipité.

En considérant la variation du comportement mécanique en fonction de la fraction volumique à 700K (Figure 5.11), les tendances suivantes sont observées :

- lorsque la fraction volumique passe de 38% à 49%, en traction, on note une petite augmentation de la limite d'élasticité, pendant que la résistance mécanique diminue un peu. En compression, on assiste plutôt à une diminution de la limite d'élasticité, et à une faible augmentation de la résistance mécanique ;
- si la fraction volumique passe de 49% à 56%, la limite d'élasticité diminue en traction et augmente en compression, tandis que la résistance mécanique augmente quel que soit le sens de sollicitation ;
- une diminution des limites d'élasticité en traction et en compression est constatée, quand la fraction volumique passe de 56% à 63% ; alors que la résistance mécanique diminue un peu en traction et connaît une faible augmentation en compression.

En comparant les comportements obtenus selon le sens de la sollicitation, on peut voir avec la Figure 5.10 que l'asymétrie observée sur la limite d'élasticité diminue de manière considérable avec l'augmentation de la température quelle que soit la fraction volumique considérée. Avec les fractions de 38% et 56%, les asymétries observées sur les résistances mécaniques à 300K et 700K sont similaires. En revanche, avec les fractions volumiques de 49% et 63%, l'asymétrie observée sur la résistance mécanique est plus faible à 700K qu'à 300K.

Mécanismes de plasticité

De la même manière qu'il a été observé sur les microstructures ayant des fractions volumiques de l'ordre de 49%, au début du chargement, les mécanismes de plasticité sont pilotés, pour toutes les fractions volumiques, par les dislocations de misfit résidants aux interfaces $\gamma' / \gamma\text{-Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$. Ces premiers mouvements de dislocations, qui déterminent la limite d'élasticité, sont observés dans des endroits différents selon le sens de sollicitation :

- en compression, les dislocations qui résident dans les quatre faces parallèles à l'axe de sollicitation pilotent les premiers événements plastiques ;
- en traction, le début de la plasticité est gouverné par les dislocations résidant dans les deux faces perpendiculaires à l'axe de sollicitation.

L'évolution du mécanisme de plasticité, qui est lié à la résistance mécanique, est inchangée quelle que soit la fraction volumique considérée. Cependant, en fonction de cette dernière, les pourcentages de défauts formés varient.

La Figure 5.12 présente l'évolution des quantités moyennes de défauts formés à température ambiante (300K) en fonction de la fraction volumique. En compression, lorsque la

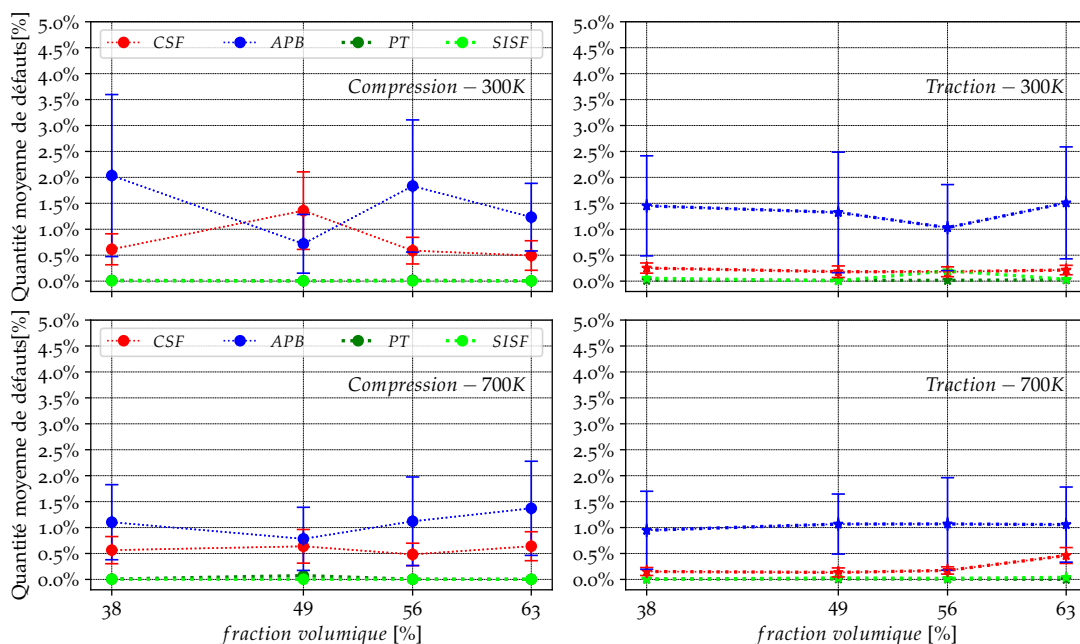


FIGURE 5.12 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K et à 700K : évolution des quantités moyennes de défauts dans les précipités de forme cubique lors des sollicitations en compression et en traction en fonction de la fraction volumique (les barres d'erreurs représentent les écarts types calculés sur les moyennes).

fraction volumique augmente en passant de 38% à 49%, il apparaît une diminution de la quantité moyenne d'APB, tandis que où la quantité moyenne de CSF augmente. Si la fraction volumique passe de 49% à 56%, la quantité moyenne d'APB s'accroît cette fois,

pendant que la quantité moyenne de *CSF* diminue. Si la fraction volumique passe de 56% à 63%, les quantités moyennes d'*APB* et de *CSF* diminuent. Les quantités moyennes de *PT* et de *SISF* formées restent très faibles devant les quantités d'*APB* et de *CSF*.

En traction, les variations observées sur les quantités moyennes de défauts en fonction de la fraction volumique sont moins importantes que celles observées en compression. Contrairement à la tendance observée en compression sur les quantités moyennes de *SISF*, qui restent très faibles devant les quantités moyennes d'*APB* et de *CSF*; en traction, à une fraction volumique de 56%, on assiste à la formation d'une quantité moyenne de *SISF* qui est du même ordre que la quantité moyenne de *CSF* formée (Figure 5.12).

Selon le sens de sollicitation, s'il est observé selon les fractions volumiques considérées la formation d'une quantité moyenne d'*APB* plus importantes en traction (49% et 63%) ou en compression (38% et 56%), la quantité moyenne de *CSF* formées pour toutes les fractions volumiques, reste plus élevée en compression qu'en traction. À une fraction volumique de 56%, il se forme une quantité moyenne de *SISF* plus importante en traction qu'en compression (Figure 5.12). Là encore, il faut souligner que les variations des défauts restent limitées.

L'évolution des quantités moyennes de défauts en fonction de la fraction volumique à 700K est donnée par la Figure 5.12. Les variations observées sur les quantités moyennes d'*APB* en traction et en compression, de même que celles constatées sur les quantités moyennes de *CSF* en compression, en fonction de la fraction volumique, sont moins importantes à 700K qu'à 300K. Concernant les quantités moyennes de *CSF* en traction, des variations moins importantes à 300K qu'à 700K sont constatées. Avec l'augmentation de la température, il est observé une diminution des écarts obtenus sur les quantités moyennes d'*APB* formées en traction et en compression pour toutes les fractions volumiques. À une fraction volumique de 63%, contrairement à la tendance observée à 300K, la quantité moyenne d'*APB* formées en compression devient supérieure à celle formées en traction. Les écarts observés entre les quantités moyennes de *CSF* formées en traction et en compression à 300K et à 700K, restent similaires, sauf à une fraction volumique de 49% où l'on note un écart plus important à 300K qu'à 700K.

INFLUENCE DE LA FRACTION VOLUMIQUE DES RENFORTS DE FORME CUBIQUE ARRONDIE SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES SYSTÈMES $\gamma' / \gamma\text{-Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$

Dans cette section, les études sont limitées à l'analyse de l'effet de la forme sur l'évolution du module et de la limite d'élasticité en fonction de la fraction volumique.

Pour étudier l'incidence de la forme du renfort sur la variation du comportement mécanique en fonction de la fraction volumique, quatre microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie occupant des fractions volumiques proches de celles obtenues avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique ont été générées. Les structures de dislocations de misfit obtenues après les étapes de thermalisation à 300K et à 700K, au niveau des interfaces entre les phases $\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ pour des fractions volumiques de l'ordre de 37%, 48%, 55% et 62% sont présentées aux Figures 5.13 et 5.14. De la même manière qu'il a été observé sur des microstructures avec des renforts de forme cubique, la forme et l'état de dissociation des structures de dislocations de misfit changent selon la fraction volumique. Lorsque la température passe de 300K à 700K, une évolution de l'état de dissociation des dislocations de misfit qui se forment au niveau de l'interface est notée pour toutes les fractions volumiques. Ceci se traduit par une augmentation des densités de dislocations. Néanmoins, la variation de la densité de dislocations observée lorsque la fraction volumique augmente reste similaire quelle que soit la température.

Comparées aux structures de dislocations de misfit obtenues avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique (Figure 5.8), une diminution de la densité de dislocations est notée avec l'arrondissement des renforts.

Comportement mécanique

La Figure 5.15 montre l'évolution des comportements mécaniques obtenus en effectuant des tests de traction et de compression à 300K sur les microstructures avec des renforts de forme cubique arrondie. On note une faible diminution du module d'élasticité avec l'augmentation de la fraction volumique à partir d'une fraction volumique de 55%. Le module d'élasticité passe de 125GPa à 124GPa, puis de 124GPa à 123GPa lorsque la fraction volumique passe respectivement de 48% à 55%, puis de 55% à 62%. Cette faible variation constatée à température ambiante n'est pas observée avec les microstructures contenant les renforts de forme cubique. Les variations constatées sur la limite d'élasticité en fonction de

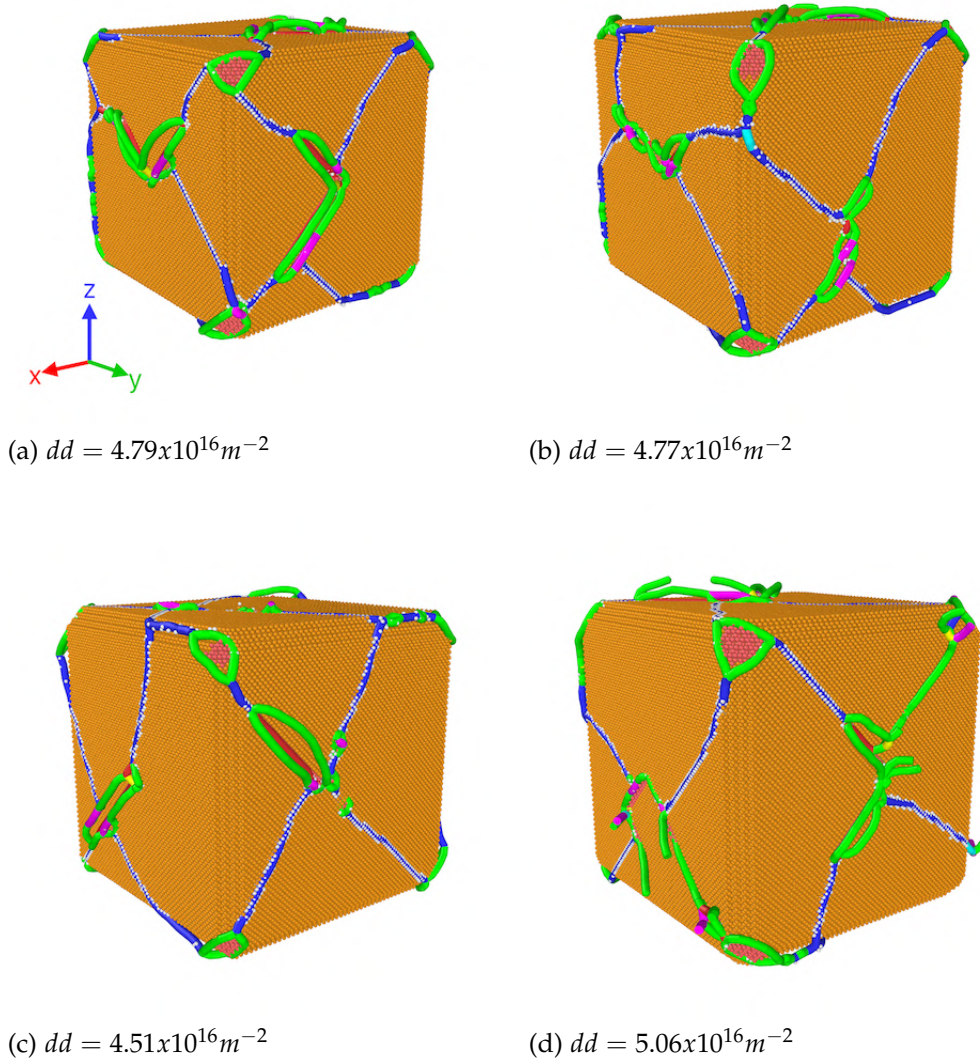
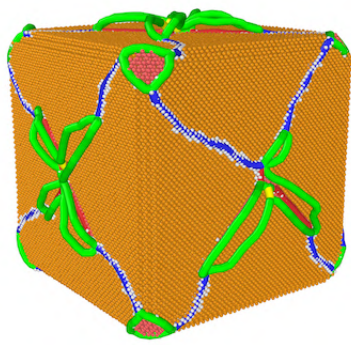


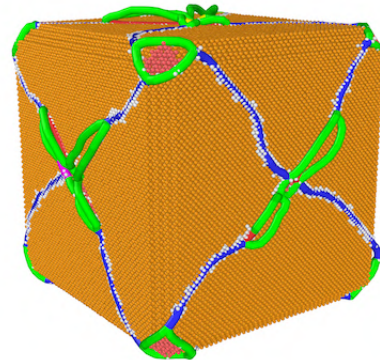
FIGURE 5.13 – Impact de la fraction volumique sur le comportement mécanique à 300K : évolution de la structure de dislocations de misfit obtenue après la thermalisation pour des microstructures contenant des renforts cubiques arrondis, occupant des fractions volumiques de l'ordre de 37%-(a), 48%-(b) 55%-(c) et 62%-(d) (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).

la fraction volumique diffèrent aussi avec l'arrondissement des renforts.

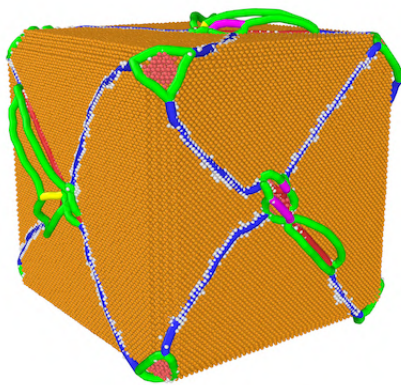
En traction, il est noté une augmentation suivie d'une diminution de la limite d'élasticité. La limite d'élasticité augmente en passant de 1.78GPa à 1.85GPa lorsque la fraction volumique passe de 37% à 48%, puis diminue en prenant les valeurs de 1.68GPa et de 1.08GPa lorsque la fraction volumique prend respectivement les valeurs de 55% et 62%. En compression, les limites d'élasticité obtenues pour toutes les fractions volumique sont



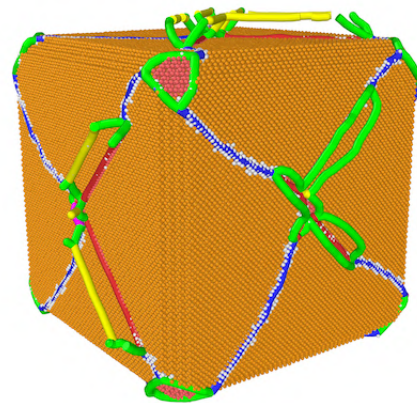
(a) $dd = 5.57 \times 10^{16} m^{-2}$



(b) $dd = 4.88 \times 10^{16} m^{-2}$



(c) $dd = 5.06 \times 10^{16} m^{-2}$



(d) $dd = 5.69 \times 10^{16} m^{-2}$

FIGURE 5.14 – Impact de la fraction volumique sur le comportement mécanique à 700K : évolution de la structure de dislocations de misfit obtenue après la thermalisation pour des microstructures contenant des renforts cubiques arrondis, occupant des fractions volumiques de l'ordre de 37%-(a), 48%-(b) 55%-(c) et 62%-(d) (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).

similaires.

Lorsque la température augmente, passant de 300K à 700K, une diminution du module d'élasticité est observée quels que soient le sens de sollicitation et la fraction volumique. La Figure 5.16 présente l'évolution des comportements mécaniques observés à 300K en fonction de la fraction volumique. Les propriétés mécaniques obtenus à 300K et à 700K en fonction de la fraction volumique sont aussi indiquées au tableau 5.4.

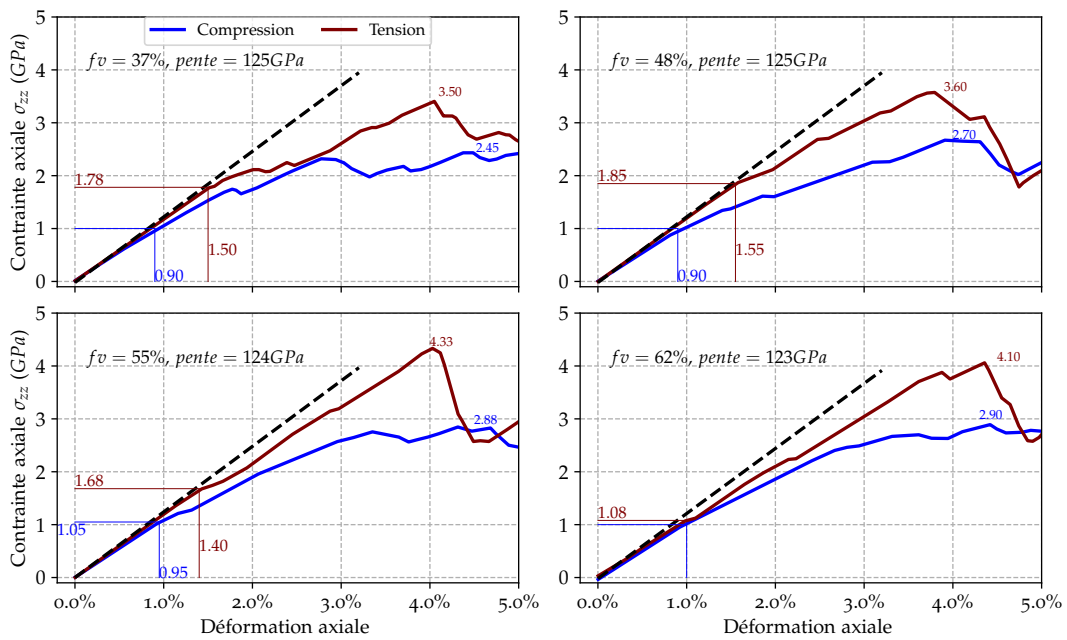


FIGURE 5.15 – Comportement mécanique à 300K : impact de la variation de la fraction volumique sur le comportement mécanique des microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie lors des tests de compression (bleue) et de traction (marron) selon la direction $[001]$.

En traction, si une diminution de la limite d'élasticité est constatée pour les fractions volumiques de 37% et 48%, la tendance inverse apparaît pour les fractions volumiques de 55% et 62%. En compression, les limites d'élasticité obtenues à 300K et à 700K pour une fraction volumique de 37% sont similaires. Cependant, pour toutes les autres fractions volumiques, une diminution de la limite d'élasticité est observée avec l'augmentation de la température (tableau 5.4).

À 300K, pour tous les fractions volumiques, l'asymétrie de la limite d'élasticité est moins importante avec les microstructures contenant les renforts de forme cubique arrondie (Figure 5.17) qu'avec celles ayant des renforts de forme cubique (figure 5.10). À 700K, des asymétries similaires sont observées avec les fractions volumiques de 37% et 48% pour les deux formes de précipité (cubique et cubique arrondie). Cependant, avec les fractions volumiques de 55% et 62%, des asymétries plus importantes sont obtenues avec les renforts de forme cubique arrondie comparativement aux renforts de forme cubique.

Mécanismes de plasticité

Les dislocations de misfit résidant au niveau de l'interface entre les phases $\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ pilotent les mécanismes de plasticité au début du chargement, comme il a été observé avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie occupant une fraction de l'ordre de 48% (Figure 5.3). La modification de la forme des précipités peut

300K	$E(\text{GPa})$	$Y_T(\text{GPa})$	$Y_C(\text{GPa})$	Y_T/Y_C	$R_T(\text{GPa})$	$R_C(\text{GPa})$	R_T/R_C
$fv = 37\%$	125	1.78	1.00	1.78	3.50	2.45	1.43
$fv = 48\%$	125	1.85	1.00	1.85	3.60	2.70	1.33
$fv = 55\%$	124	1.68	1.05	1.60	4.33	2.88	1.50
$fv = 62\%$	123	1.08	1.00	1.08	4.10	2.90	1.41
700K	$E(\text{GPa})$	$Y_T(\text{GPa})$	$Y_C(\text{GPa})$	Y_T/Y_C	$R_T(\text{GPa})$	$R_C(\text{GPa})$	R_T/R_C
$fv = 37\%$	102	1.10	1.10	1.00	3.64	2.20	1.65
$fv = 48\%$	105	1.22	0.76	1.60	3.38	2.48	1.36
$fv = 55\%$	107	1.95	0.74	2.63	3.88	3.00	1.29
$fv = 62\%$	105	1.50	0.76	1.98	3.42	2.42	1.41

TABLE 5.4 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K et 700K contenant des renforts de forme cubique arrondie : valeurs du module d'élasticité $E(\text{GPa})$ (qui est le même en traction et en compression), des limites d'élasticité $Y_T(\text{GPa})$ et $Y_C(\text{GPa})$ (en traction et en compression respectivement), du ratio Y_T/Y_C représentant l'asymétrie sur la limite d'élasticité, des résistances mécaniques $R_T(\text{GPa})$ et $R_C(\text{GPa})$ (en traction et en compression respectivement) et du ratio R_T/R_C représentant l'asymétrie sur la résistance mécanique en fonction de la fraction volumique du précipité.

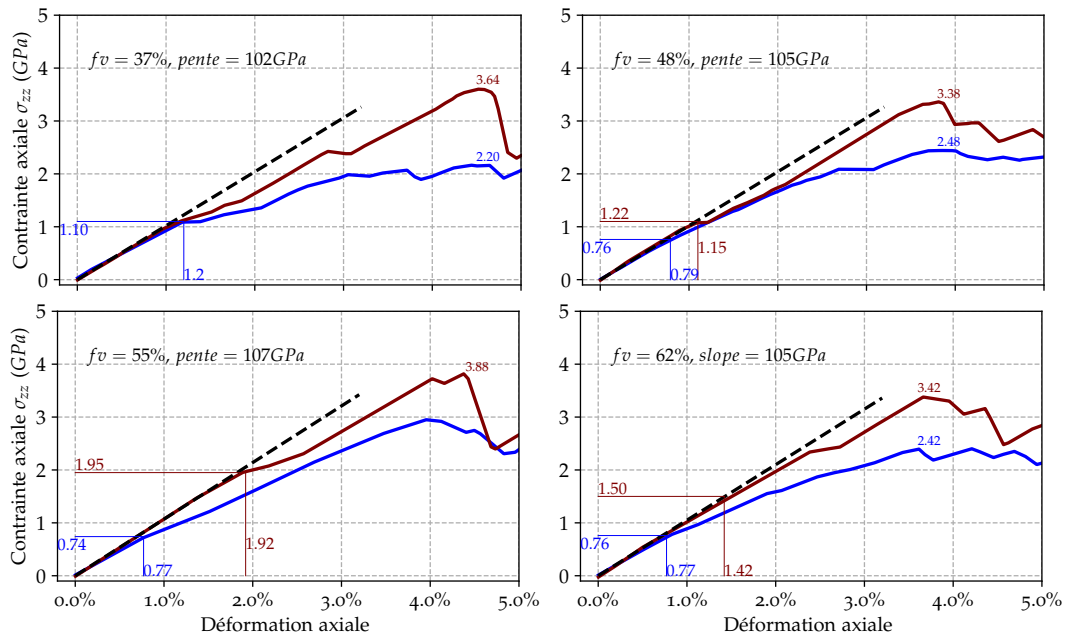


FIGURE 5.16 – Comportement mécanique à 700K : impact de la variation de la fraction volumique sur le comportement mécanique des microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie lors des tests de compression (bleue) et de traction (marron) selon la direction $[001]$.

avoir un impact sur la manière dont ils sont cisailés par les dislocations [Yashiro et al., 2002]. Si à 300K, les mécanismes de plasticité restent similaires quelle que soit la forme du précipité ou la fraction volumique, à 700K, une différence a été remarquée sur le mode de glissement des dislocations avec l'augmentation de la fraction volumique. En effet, les

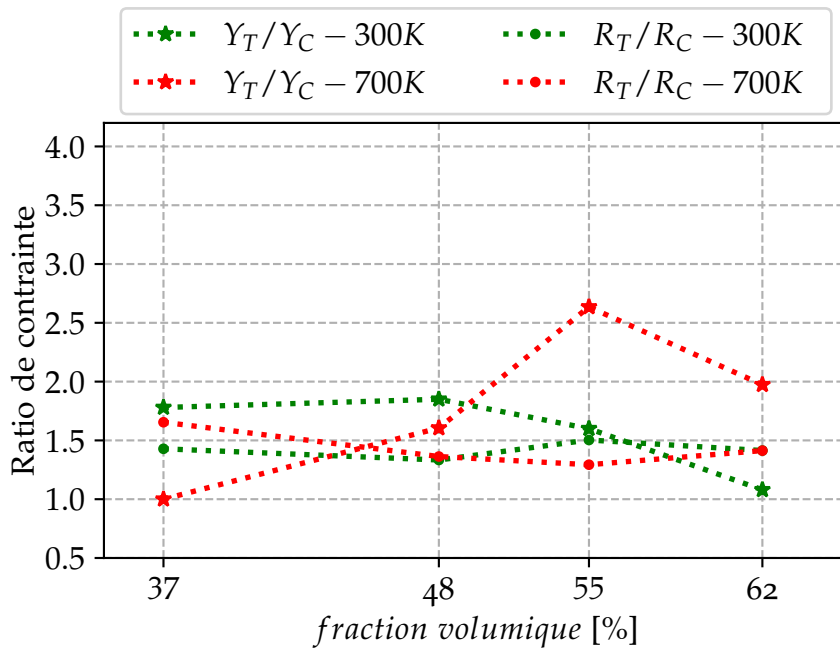


FIGURE 5.17 – Comportement mécanique du système $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 300K et à 700K : impact de la fraction volumique des renforts de forme cubique arrondie sur l'évolution de l'asymétrie en traction/compression observée sur la limite d'élasticité (Y_T/Y_C) et sur la résistance mécanique (R_T/R_C) à 300K et à 700K.

simulations ont montré qu'avec les cubes arrondis, à 700K, à des fractions volumiques de 55% et 62%, les dislocations qui glissent par paire de partielles de Shockley peuvent faire plusieurs glissements croisés suivant les plans $\{111\}$ avant d'atteindre l'interface. La figure 5.18 montre un exemple typique de ce type de glissement qui se produit à 700K dans un précipité occupant une fraction volumique de l'ordre de 62%. À un niveau de chargement de 3.00%, il est observé deux dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, séparées par un CSF, qui glissent en laissant derrière elles des APBs (Figure 5.18a). Lorsque le chargement augmente à 3.50%, il se produit un premier glissement dévié d'un plan $\{111\}$ vers un autre plan $\{111\}$ (Figure 5.18b). Si la déformation augmente à 3.80%, on assiste à un autre glissement dévié vers un plan parallèle au plan de glissement initial (avant le premier glissement dévié Figure 5.18c). Un autre glissement dévié vers un plan parallèle cette fois au deuxième plan de glissement sera observé, lorsque la déformation augmente encore (Figure 5.18d). Le processus se répète jusqu'à ce que la paire de dislocations atteigne l'interface. À température ambiante, les glissements croisés observés s'effectuent en une seule fois d'un plan $\{111\}$ vers un autre plan $\{111\}$ (Figures 4.12 et 4.13) et se dirigent ensuite vers l'interface.

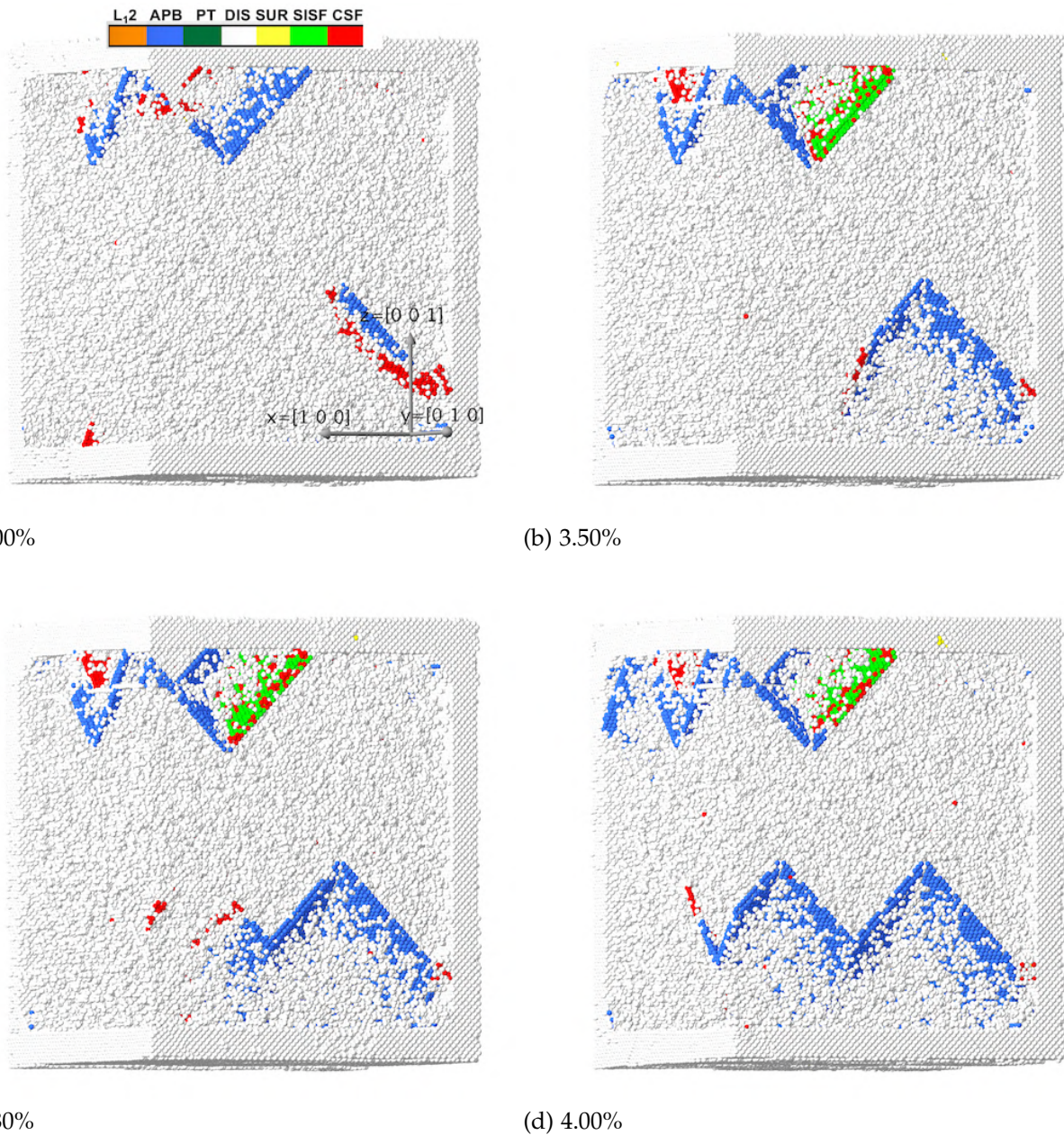


FIGURE 5.18 – Evolution des mécanismes de plasticité à 700K : glissement dévié sur plusieurs plans $\{111\}$ d'une paire de dislocations partielles de Shockley, observé lors de la sollicitation en traction (un mécanisme similaire est aussi observé en compression) d'une microstructure contenant un renfort de forme cubique arrondie occupant une fraction volumique de 62%. Seules les mécanismes de plasticité se produisant dans la phase γ' sont ici représentés.

DISCUSSION

Dans cette partie, il a été choisi de se limiter à la discussion des résultats observés sur l'influence de la forme et de la fraction volumique sur le module et la limite d'élasticité. La manière dont la résistance mécanique est définie fait que cette dernière dépend de la déformation totale fixée et de la graine aléatoire (réf. section B de l'annexe). Autrement dit, en lançant plusieurs fois le même calcul pour des déformations maximales et/ou avec des grains aléatoires différentes, il est possible de trouver des variations sur la résistance mécanique. Étant donné que ces variations sont du même ordre de grandeur que celles dues à l'impact de la forme ou de la fraction volumique, il devient peu pertinent de mener une discussion sur les variations de la résistance mécanique causées par ces dernières (la forme et la fraction volumique).

Effet de la forme sur le comportement mécanique

Les simulations ont montré qu'à température ambiante, avec l'arrondissement des coins et des arêtes des renforts, la limite d'élasticité en traction diminue alors qu'en compression, elle reste la même (Figure 5.2). Avec l'augmentation de la température, les modules et les limites d'élasticités identifiés changent peu quel que soit le sens de la sollicitation et la forme du précipité. Pour comprendre les variations observées sur la limite d'élasticité, nous nous sommes intéressés à deux points :

- les évolutions des densités de dislocations au niveau de l'interface en fonction de la forme à 300K, 500K, 700K et 1073K à un niveau de déformation où la limite d'élasticité est atteinte. La Figure 5.19 montre l'évolution des densités de dislocations de type glissile (les dislocations partielles de Shockley et parfaites de type $1/6 \langle 112 \rangle$ et $1/2 \langle 110 \rangle$ respectivement qui ont la facilité de se déplacer dans un réseau CFC) et de type sessile (les autres types de dislocations telles que celles de type $1/6 \langle 110 \rangle$, $1/3 \langle 100 \rangle$, $1/3 \langle 111 \rangle$, etc, qui se déplacent difficilement dans un réseau CFC) en fonction de la température, selon la forme du précipité en traction et en compression.
- à la distribution des contraintes de cisaillement (σ_{xy} , σ_{xz} et σ_{yz}) à température ambiante (300K) et à 1073K pour une microstructure contenant des renforts de forme cubique arrondie avec un coefficient d'arrondissement de 0.45 (Figure 5.20).

En se basant sur l'évolution des densités de dislocations, en traction, à température ambiante (300K), lorsque le coefficient d'arrondissement s'accroît, la densité des dislocations de type glissile augmente faiblement, au moment où la densité des dislocations de type

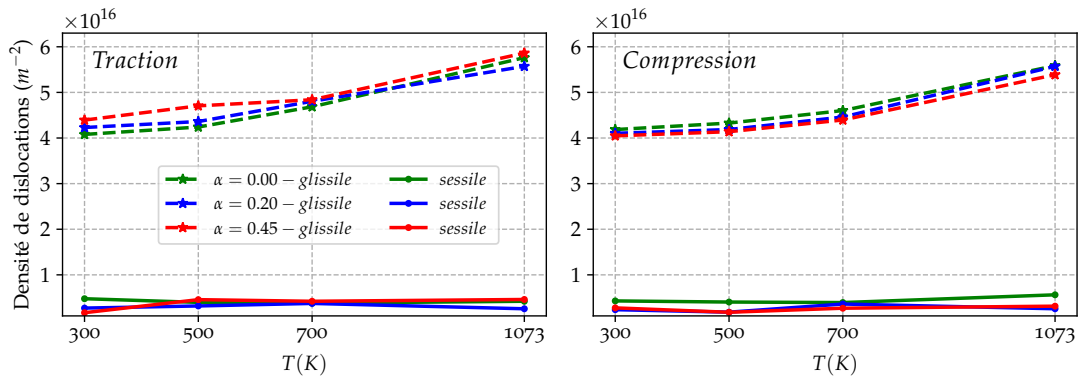


FIGURE 5.19 – Évolution des densités de dislocations de misfit de type glissile et sessile en fonction de la forme du précipité au début de la plasticité à 300K, 500K, 700K et 1073K.

sessile diminue. L'augmentation de la densité des dislocations de type glissile ainsi que la diminution de celle de type sessile avec l'arrondissement des précipités entraînent la diminution de la limite d'élasticité. À 500K, 700K et 1073K, les densités de dislocations de type glissile obtenues pour les coefficients d'arrondissement de 0.00 et 0.20 restent similaires. Avec un coefficient d'arrondissement de 0.45, à 500K et 1073K, il est observé des densités de dislocations de type glissile (qui ont un effet d'adoucissement) et sessile (qui ont un effet de durcissement) plus élevées que celles trouvées avec des coefficients d'arrondissement de 0.00 et 0.20. Ces deux effets (adoucissement et durcissement) antagonistes, font que la limite d'élasticité reste similaire à celles obtenues avec des coefficients d'arrondissement de 0.00 et 0.20. À 700K, les densités de dislocations de type glissile et sessile obtenues restent similaires pour toutes les formes. Par conséquent, les limites d'élasticités obtenues aux températures de 500K, 700K et 1073K restent similaires.

En compression, quelle que soit la température, des densités de dislocations de type glissile similaires sont obtenues pour toutes les formes de précipités envisagées. Néanmoins, des variations peuvent être observées sur les densités de dislocations de type sessile. Mais comme les quantités de dislocations de type glissile mises en mouvement sont plus importantes en compression (les dislocations résidant dans les quatre faces parallèles à l'axe de sollicitation) qu'en traction (les dislocations résidant dans les deux faces perpendiculaires à l'axe de sollicitation), l'effet des dislocations de type sessile est moins marqué en compression qu'en traction. Par conséquent, les limites d'élasticité observées en compression évoluent peu avec la forme.

Pour toutes les formes évaluées, les simulations ont montré une diminution du module et de la limite d'élasticité avec l'augmentation de la température. Cette observation peut être liée à l'augmentation de la densité de dislocations de type glissile et/ou à la diminution de la densité de dislocations de type sessile (Figure 5.19).

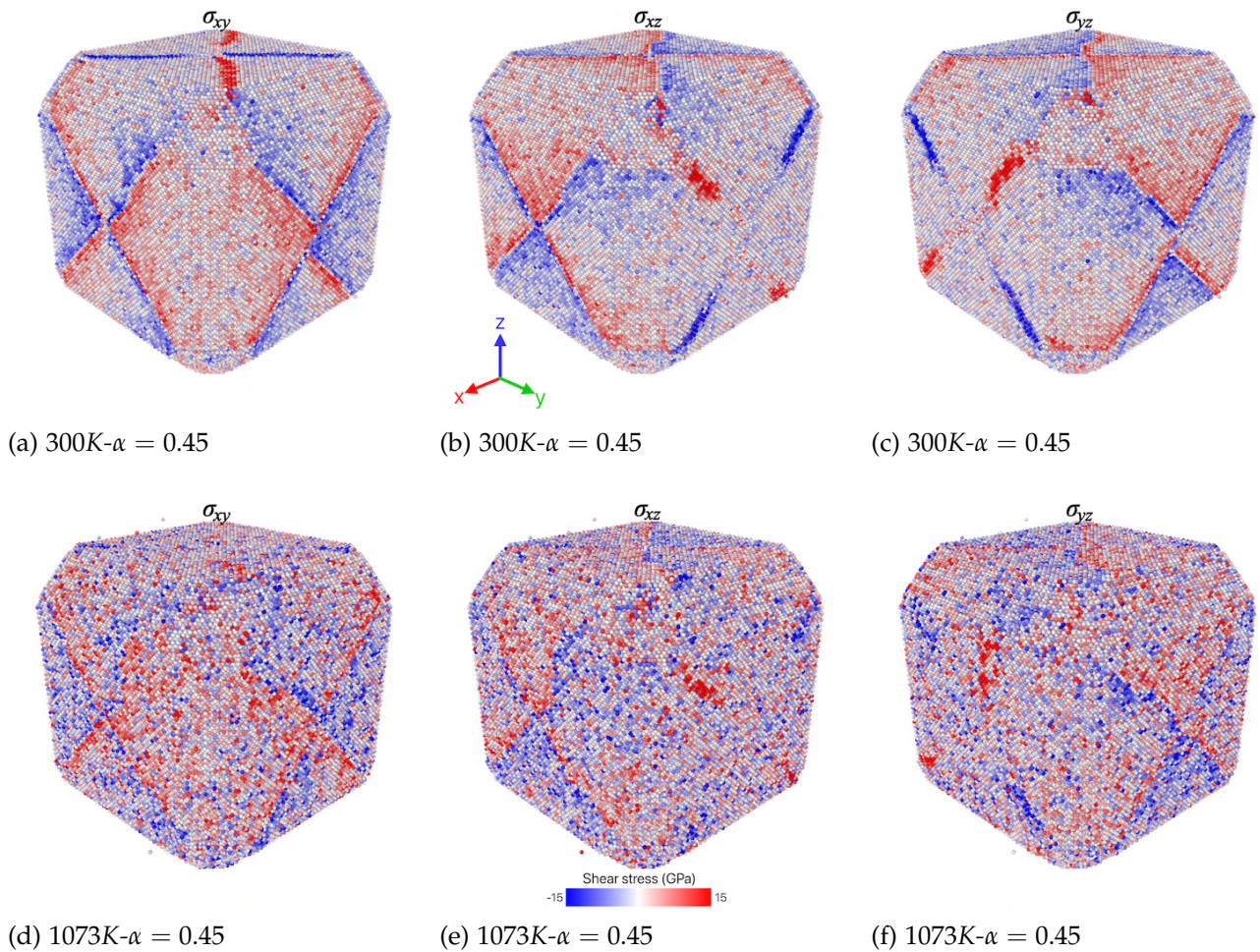


FIGURE 5.20 – Distribution des contraintes de cisaillement (σ_{xy} , σ_{xz} et σ_{yz}) au niveau de l'interface entre les phases $\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ après les étapes thermalisation à 300K (a, b et c) et 1073K (d, e et f); pour plus de visibilité la phase $\gamma\text{-Ni}$ est supprimée et seul le précipité $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ et l'interface sont montrés.

La variation de l'asymétrie sur la limite d'élasticité en fonction de la forme observée à température ambiante (tableau 5.1), est due à la variation de la limite d'élasticité en traction. Pour des températures de 500K, 700K et 1073K, des asymétries similaires sont observées quelle que soit la forme du précipité.

En ce qui concerne les distributions des contraintes de cisaillement (σ_{xy} , σ_{xz} et σ_{yz}) données par la Figure 5.20, avec l'arrondissement des renforts, à température ambiante, la concentration de contraintes au niveau de l'interface diminue comparées aux renforts de forme cubique (réf. figure 4.24 du chapitre 4). Cette relaxation entraîne la diminution de la limite d'élasticité observée en traction, et par voie de conséquence, l'asymétrie traction/compression observée sur la limite d'élasticité. Avec l'augmentation de la température, il apparaît une diminution de la concentration de contraintes au niveau de l'interface qui est due à une relaxation, elle-même due à la diminution du paramètre de misfit (réf. Figure 4.17 du chapitre 4). Les concentrations de contraintes obtenues avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie deviennent similaires à celles observées avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique. C'est la raison pour laquelle, les limites d'élasticité obtenues en traction et en compression deviennent similaires pour toutes les formes du précipité.

Concernant l'évolution du mécanisme de plasticité à l'intérieur du précipité, les simulations ont montré que, si les types de défauts formés restent les mêmes quelle que soit la forme du renfort, les quantités de défauts varient avec l'arrondissement des renforts (Figures 5.4 et 5.6). Ceci est attribué à deux causes :

- d'une part à l'impact de la forme avec l'arrondissement des renforts qui favorise une augmentation des glissements de dislocations appariées, ainsi que la diminution des glissements de dislocations individuelles ;
- d'autre part à l'impact de la température qui favorise à la fois une diminution de l'activité des dislocations, ainsi qu'un glissement par paire de dislocations à l'intérieur du précipité.

À température ambiante (300K), l'augmentation de la quantité d'APB, ainsi que la diminution de la quantité de CSF constatées en compression (Figure 5.4), peuvent être attribuées respectivement à l'augmentation du glissement par paire, ainsi qu'à la diminution du glissement individuel des dislocations qui sont causées par l'arrondissement des renforts. En traction, la faible diminution de la quantité d'APB peut être liée au fait qu'avec l'arrondissement des renforts, le cisaillement du précipité en traction devient un peu plus difficile, du fait qu'on a plus d'activité de dislocations au niveau de l'interface

qu'à l'intérieur du précipité.

Selon le sens de sollicitation, l'augmentation du glissement par paire et la diminution du glissement individuel des dislocations avec l'arrondissement des renforts, observées en compression, peut expliquer aussi le fait qu'on a une quantité d'*APB* plus importante en compression qu'en traction, contrairement à la tendance observée avec les renforts cubiques. Ceci explique aussi la diminution de l'écart entre les quantités moyennes de *CSF* formées en compression et en traction constatée avec l'arrondissement des renforts.

En compression, à 500K (Figure 5.6), pour un coefficient d'arrondissement de 0.20, la diminution de la quantité moyenne d'*APB* peut ainsi être liée à la diminution de l'activité des dislocations. Cependant, lorsque le coefficient d'arrondissement augmente, en passant de 0.20 à 0.45, l'effet de la forme fait qu'une tendance similaire à celle observée à 300K (une augmentation de la quantité d'*APB* et une diminution de la quantité de *CSF*) se manifeste. À 700K, les quantités moyennes de défauts restent similaires pour les coefficients d'arrondissement de 0.00 et 0.20. En revanche, lorsque ce dernier passe de 0.20 à 0.45, la même tendance observée à 300K et à 500K (une augmentation de la quantité d'*APB* et une diminution de la quantité de *CSF*) est constatée. Cependant, du fait de la diminution de l'activité des dislocations due à l'augmentation de la température, des variations, de moins en moins importantes, sont observées sur les quantités de défauts. À 1073K, en compression, la même tendance observée à 300K est obtenue, c'est-à-dire, une augmentation de la quantité d'*APB* et une diminution de la quantité de *CSF*, suite à l'arrondissement des renforts. Mais, pour les mêmes raisons que celles soulignées à 700K, la variation de quantité de défauts observée à 1073K est plus faible que celle observée à 300K.

En traction, l'impact de la forme du précipité sur les variations des quantités moyennes de défauts restent très faibles. Par conséquent, les variations des quantités de défauts, dues à la température, restent similaires indépendamment de la forme du renfort.

Il faut noter que, même si des efforts ont été consentis pour expliquer les variations des quantités moyennes de défauts en fonction de la forme, avec la prise en compte de l'impact de la température, la coexistence de l'effet de ces deux paramètres (forme et température) sur le comportement mécanique font qu'il est très difficile d'expliquer ces variations lors de la sollicitation des microstructures.

Les études menées sur les nanoparticules isolées de Ni_3Al ont montré que la forme du précipité joue un rôle déterminant sur le comportement mécanique, et particulièrement

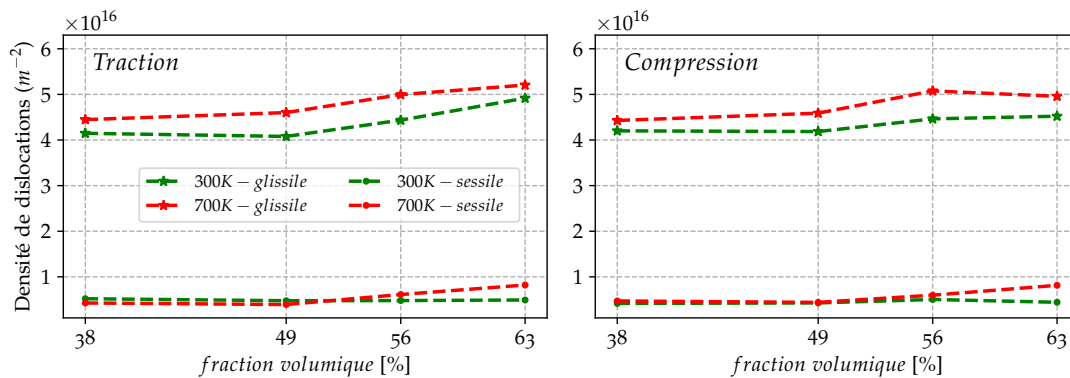


FIGURE 5.21 – Évolution des densités de dislocations de misfit de type glissile et sessile au niveau de l'interface entre la phase $\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ de forme cubique en fonction de la fraction volumique du précipité au début de la plasticité à 300K et 700K.

sur l'initiation des mécanismes de plasticité. Les résultats présentés dans ce chapitre ont montré que l'impact de la forme du renfort Ni_3Al , sur le comportement mécanique des systèmes $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni-}\gamma'/\gamma$ reste non négligeable. Avec les nano-cubes arrondis isolés de Ni_3Al , deux modes de déformation peuvent être observés en fonction de la taille, du coefficient d'arrondissement et de la température : un mode de déformation homogène commençant avec la nucléation de dislocations au centre de la nanoparticule et un mode de déformation hétérogène débutant avec la nucléation de dislocations à partir de la surface de la nanoparticule. Cependant, dans le cas d'un nano-cube arrondi de Ni_3Al intégré dans une matrice de Ni , le début des mécanismes de plasticité est plutôt piloté par les dislocations de misfit résidant au niveau de l'interface entre le nano-cube arrondi et la matrice dans laquelle il est intégré. Ceci reste vrai quels que soient la taille, le coefficient d'arrondissement et la température.

Impact de la fraction volumique des renforts de forme cubique sur le comportement mécanique

Lorsque la fraction volumique du précipité augmente, les simulations ont montré différentes tendances selon la température et le sens de sollicitation.

À température ambiante (300K), avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique, quelle que soit la fraction volumique du précipité, les mêmes modules d'élasticité sont obtenus. Lorsque la fraction volumique augmente en passant de 38% à 49%, aussi bien en traction qu'en compression, les limites d'élasticité restent similaires. Cependant, lorsque la fraction volumique augmente encore (avec des fractions volumiques de 56% et 63%), les limites d'élasticité en traction et en compression diminuent. En considérant l'évolution des densités de dislocations de misfit à un niveau de chargement où la limite

d'élasticité est atteinte (Figure 5.21), les variations observées sur la limite d'élasticité en traction et en compression peuvent être expliquées. En effet, lorsque la fraction volumique passe de 38% à 49%, en traction et en compression, les densités de dislocations de type glissile restent similaires, ce qui explique le fait que les limites d'élasticité obtenues évoluent peu. Lorsque la fraction volumique augmente encore en prenant les valeurs de 56% et 63%, l'augmentation des densités de dislocations de type glissile en traction et en compression (Figure 5.21) provoque les diminutions observées sur les limites d'élasticité. Les densités de dislocations de type sessile quelle que soit la fraction volumique, restent similaires.

À 700K, les variations des densités de dislocations en fonction de la fraction volumique ne permettent pas d'expliquer toutes les variations observées sur le comportement mécanique en fonction de la fraction volumique. Les simulations ont montré une faible augmentation du module d'élasticité avec l'augmentation de la fraction volumique. Ces variations observées sur le module d'élasticité peuvent être attribuées à l'augmentation de la fraction volumique du précipité. En effet, avec l'augmentation de la température, l'impact du précipité sur le comportement mécanique devient plus important, et le début du mécanisme de plasticité est par conséquent piloté à la fois par la fraction volumique du précipité et la structure de dislocations de misfit.

En traction, malgré la faible augmentation observée en termes de densités de dislocations de type glissile (dislocations qui ont la faculté de se déplacer facilement dans un réseau CFC), quand la fraction volumique passe de 38% à 49%, il est constaté que la limite d'élasticité augmente un peu en passant de 1GPa à 1.22GPa, au lieu de diminuer. À une fraction volumique de 49%, les dislocations de misfit restent peu dissociées par rapport aux dislocations observées à une fraction volumique de 38%. Donc, l'augmentation de la fraction volumique crée un effet de renforcement, d'où l'augmentation de la limite d'élasticité observée. Pour des fractions volumiques de 56% et 63%, malgré le fait que la fraction volumique augmente, il apparaît une diminution de la limite d'élasticité, car la structure de dislocations de misfit est dans un état de destruction avancé, ce qui entraîne la diminution de la limite d'élasticité.

En compression, avec l'augmentation de la densité de dislocations de type glissile, lorsque la fraction volumique passe de 38% à 49%, la limite d'élasticité diminue en passant de 1GPa à 0.76GPa. À une fraction volumique de 56%, malgré le fait que la structure de dislocations de misfit soit dans un état de dissociation (destruction) plus avancé que celle obtenue à une fraction volumique de 49%, la formation de dislocations de type sessile (de vecteurs de Burgers $1/3 \langle 111 \rangle$ indiquées par la flèche noire à la Figure 5.14) au niveau

des faces parallèles à la l'axe de sollicitation (faces dans lesquelles résident les dislocations qui sont sollicitées en compression) crée un effet de durcissement qui se manifeste par une petite augmentation de la limite d'élasticité qui passe de 0.73GPa à 0.92GPa. À une fraction volumique de 63%, comme l'état de dissociation de la structure de dislocations de misfit est très avancé, la limite d'élasticité chute en passant de 0.92GPa à 0.42GPa malgré l'augmentation du volume du précipité.

Les différences de comportement observées à 300K et à 700K font que les asymétries sur la limite d'élasticité observées à ces températures varient de manière différentes en fonction de la température (Figure 5.10). Néanmoins, l'asymétrie observée à température ambiante (300K) reste plus élevée que celle observée à 700K pour tous les fractions volumiques. Ceci est lié à la diminution du paramètre de misfit avec l'augmentation de la température.

Concernant les quantités moyennes de défauts formés en fonction de la fraction volumique à 300K (Figure 5.12), des variations chaotiques ont été observées. Malgré l'atténuation de ces variations observée à 700K (Figure 5.12), il peut être noté qu'il est très difficile d'établir un lien entre la fraction volumique et les quantités de défauts formés.

Impact de la fraction volumique des renforts de forme cubique arrondie sur le comportement mécanique

Lorsque les renforts sont arrondis, à 300K (Figure 5.15), une faible diminution est observée sur le module d'élasticité à partir d'une fraction volumique de 55%. Cette variation peut être liée à l'effet matériau, dû à l'augmentation du volume occupé par le renfort. En effet, des études expérimentales et numériques effectuées sur des superalliages base nickel ont montré qu'à température ambiante, la matrice γ est élastiquement plus dure que le précipité γ' [Gayda and MacKay, 1989, Müller et al., 1992]. Donc, l'augmentation du volume occupé par de ce dernier, qui favorise la diminution du volume occupé par la phase γ , peut provoquer la diminution observée sur le module d'élasticité.

Une petite augmentation de la limite d'élasticité en traction est observée lorsque la fraction volumique passe de 37% à 48%. Ceci explique la faible augmentation notée sur l'asymétrie (Figure 5.17). Si la fraction volumique augmente encore, la limite d'élasticité diminue entraînant une diminution de l'asymétrie. L'augmentation, suivie de la diminution, observée sur la limite d'élasticité, peut être due respectivement à la diminution de la densité de dislocations de type glissile (lorsque la fraction volumique passe de 37% à 48), qui augmente ensuite lorsque la fraction volumique s'accroît (Figure 5.22). En compression, comme la

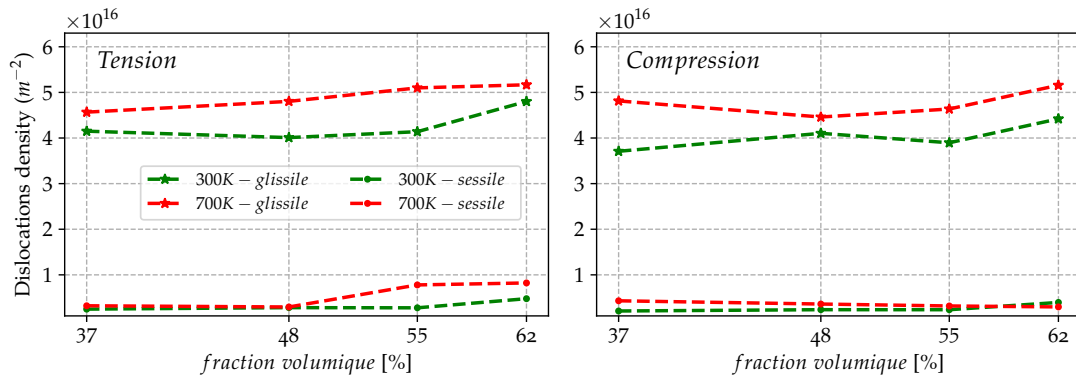


FIGURE 5.22 – Évolution des densités de dislocations de misfit de type glissile et sessile au niveau de l'interface entre la phase $\gamma\text{-Ni}$ et $\gamma'\text{-Ni}_3\text{Al}$ de forme cubique arrondie en fonction de la fraction volumique du précipité au début de la plasticité à 300K et 700K.

quantité de dislocations mises en mouvement est importante, malgré les faibles variations notées sur la densité de dislocations de type glissile, les limites d'élasticité observées restent similaires.

À 700K (Figure 5.16), contrairement à la tendance observée à température ambiante (300K), on observe une faible augmentation du module d'élasticité avec l'augmentation du volume du précipité. Ceci peut être lié au fait que, lorsque la température augmente, la phase γ devient élastiquement moins dure que la phase γ' [Gayda and MacKay, 1989, Müller et al., 1992]. D'où l'augmentation du volume occupé par ce dernier peut provoquer une augmentation du module d'élasticité.

En traction, lorsque la fraction volumique augmente de 37% à 55%, malgré l'augmentation notée sur la densité de dislocations de type glissile (Figure 5.22), la limite d'élasticité s'accroît, provoquant une augmentation de l'asymétrie. Ce comportement peut donc aussi être lié à l'augmentation de la fraction volumique du précipité. Quand la fraction volumique augmente encore en passant de 55% à 62%, le fait que la densité de dislocation continue de s'accroître peut causer la diminution observée sur la limite d'élasticité et donc de l'asymétrie. Néanmoins, à une fraction volumique de 62%, du fait de l'augmentation du volume du précipité, au moment où la limite d'élasticité est atteinte (déviation par rapport à la linéarité), aucune chute n'est observée sur la courbe. Il faut noter aussi qu'à partir d'une fraction volumique de 48%, l'augmentation de la densité de dislocations de type sessile peut participer à la résistance observée sur la matériau.

En compression, lorsque la fraction volumique augmente de 37% à 48%, la limite d'élasticité connaît une diminution qui peut être attribuée à la diminution de la densité de dislocations de types sessile (Figure 5.22). Si la fraction volumique continue d'augmenter, malgré l'augmentation de la densité de dislocations de type glissile, ainsi que la faible di-

minution de la densité de dislocations de type sessile, la limite d'élasticité ne connaît pas de diminution significative. Ceci peut être dû à l'augmentation de la fraction volumique du renfort.

Dans les microstructures contenant des renforts de forme cubique, quelle que soit la fraction volumique du précipité, une diminution de la limite d'élasticité en traction et de l'asymétrie sont observées avec l'augmentation de la température. Lorsque les renforts sont arrondis, pour des fractions volumiques assez élevées (55% et 62%), il est noté une augmentation de la limite d'élasticité, et donc de l'asymétrie, avec l'accroissement de la température. L'augmentation de la limite d'élasticité avec l'accroissement de la température, connue sous le nom d'anomalie de contrainte, est observée dans les superalliages base nickel ([Reed, 2006]). Une augmentation de l'asymétrie avec l'élévation de la température est aussi observée dans le superalliage PWA1480 ([Tsuno et al., 2008]).

CONCLUSION DU CHAPITRE

Résultats par rapport à la littérature

Le comportement mécanique des systèmes $Ni_3Al/Ni-\gamma'/\gamma$ a été étudié à différentes températures en effectuant des tests de traction et de compression uni-axiales, tout en prenant en compte l'impact de la forme et de la fraction volumique des précipités.

Une diminution de la limite d'élasticité en traction et de l'asymétrie a été observée avec l'arrondissement des renforts à température ambiante. Cela a été attribué en partie à la diminution et/ou à l'augmentation des densités de dislocations respectivement de type sessile et/ou glissile en traction, mais surtout à la diminution de la concentration de contrainte au niveau de l'interface du fait de l'arrondissement des renforts. Avec l'augmentation de la température, les asymétries trouvées deviennent similaires quelle que soit la forme du précipité, du fait qu'avec la relaxation causée par la diminution de la valeur du paramètre de misfit, les concentrations de contrainte au niveau de l'interface deviennent similaires pour toutes les formes du renfort.

Une dépendance du comportement mécanique à la fraction volumique à température ambiante (300K) et à haute température (700K) a été observée. La dépendance du comportement mécanique à la fraction volumique a été observée dans les superalliages base nickel [Gibbons and Hopkins, 1984, Murakumo et al., 2004, Lapin et al., 2009]. Cette dépendance du comportement mécanique par rapport à la fraction volumique a été attribuée à l'état de dissociation (degré de destruction) de la structure de dislocations de misfit et aux types de dislocations de misfit (sessiles ou glissiles) qui influent sur la limite

d'élasticité, mais aussi à l'effet matériau, dû à l'augmentation du volume occupé par le précipité qui impacte le module et la limite d'élasticité.

Ce qu'il faut retenir

Il faut retenir que :

- la forme et la fraction volumique des précipités ont des influences sur le comportement mécanique des systèmes Ni_3Al/Ni - γ'/γ ;
- la densité et les types de dislocations interfaciales évoluent avec la forme et la fraction volumique des précipités ;
- à température ambiante, quelle que soit la fraction volumique, l'arrondissement des précipités entraîne une diminution de la limite d'élasticité en traction ;
- à 700K, à partir d'une fraction volumique de 55%, les limites d'élasticité obtenues avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique augmentent avec l'arrondissement des renforts ;
- avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique, pour toutes les fractions volumiques, une diminution de la limite d'élasticité est observée quand la température passe de 300K à 700K ;
- avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie, pour des fractions volumiques supérieures ou égales à 55%, il est noté une augmentation de la limite d'élasticité en traction avec l'accroissement de la température.

Ces simulations ont permis d'avoir une meilleure compréhension de certains comportements mécaniques tels que l'asymétrie traction/compression, l'effet de la forme et de la fraction volumique en précipités etc ; observés dans les superalliages base nickel en se basant uniquement sur des systèmes simplifiés de types γ'/γ - Ni_3Al/Ni . Cependant, il convient de mener d'autres investigations plus complètes en effectuant par exemple des simulations sur des systèmes plus grands en termes de taille et de nombre de précipités, mais aussi, sous réserve de la disponibilité du potentiel, de mener des études sur des systèmes plus complexes en termes de chimie afin d'avoir une représentativité encore plus proche des superalliages base nickel. Ceci permettra notamment, d'étudier un système avec un misfit négatif, plus proche des cas réels/industriels.

CONCLUSION GÉNÉRALE ET PERSPECTIVES

CONCLUSION GÉNÉRALE

Le travail de cette thèse a porté sur l'étude du comportement mécanique des nanoparticules isolées et au sein d'une matrice, afin de mieux comprendre certains mécanismes qui gouvernent le comportement mécanique des matériaux métalliques multiphasés, et plus spécifiquement celui des superalliages base nickel. Pour cela, un état de l'art sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées ou non, avec un focus sur les superalliages base nickel, a été présenté. Au terme de cette analyse bibliographique, plusieurs questionnements ont émergés.

- Dans quelle mesure les modèles actuellement utilisés en dynamique moléculaire, dans le cadre de l'étude du comportement mécanique des nanoparticules isolées, sont-ils représentatifs en termes de sollicitations appliqués ? Quelles sont les conséquences sur la modélisation du comportement ?
- Quel est le comportement mécanique d'une nanoparticule isolée de Ni_3Al à haute température ? les mécanismes de déformation sont-ils comparable à ceux constatés à température ambiante ?
- Comment expliquer l'asymétrie traction/compression du comportement d'un système $\gamma' / \gamma-Ni_3Al/Ni$ à température ambiante ? À haute température ?
- Quelles sont les conséquences sur le comportement du système $\gamma' / \gamma-Ni_3Al/Ni$ des variations morphologiques et de fraction volumique du précipité Ni_3Al ?

L'étude de la pertinence des modélisations en dynamique moléculaire mises en œuvre pour comprendre le comportement mécanique des nanoparticules isolées, a montré que la définition du modèle de champ de force peut avoir un impact significatif sur la description du comportement obtenu. Trois modèles de champ de force ont été ici considérés : un modèle répulsif à contact (*IFF*), un modèle qui a un effet attractif et répulsif (*MFF*) à distance, et un modèle qui ne contient qu'une partie répulsive (*RMF*) à distance.

Des simulations de compression uni-axiale ont été effectuées sur des nanoparticules isolées d'aluminium et de nickel, avec chacun des trois champs de force à 10K et 300K, selon différentes orientations cristallographiques et pour plusieurs tailles de nanoparticules. Outre la meilleure représentativité théorique du modèle *MFF*, il est apparu que la partie

attractive de ce modèle joue un rôle clé dans l'interaction mors/particule ayant des conséquences sur les mécanismes de plasticité. En effet, à la différence des autres champs de force testés, les mécanismes de plasticité décrits avec le *MFF* présentes :

- un effet retard dans les directions [010], [111] et [123] ;
- un durcissement plus prononcé dans la direction [211].

Ces différences dans la description du comportement ont été attribuées à la partie attractive du *MFF* : cette dernière a tendance à retenir les dislocations, rendant ainsi plus difficile leur échappement à la surface de la nanoparticule. De plus, le modèle *MFF* tout comme le modèle *RMF* présente une moindre dépendance aux conditions initiales, au contraire du modèle *IFF*, pourtant largement utilisé dans la littérature. En effet les modèles *MFF* et *RMF* ont des effets progressifs, compte-tenu de leur interaction à grande distance, alors que le modèle *IFF* souffre des limitations d'un effet seuil. Ceci s'est avéré particulièrement visible dans le cadre des compressions effectuées selon les directions [110] et [120], ainsi que lors des compressions de nanoparticules de différentes tailles selon la direction [010].

Les études menées sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées de Ni_3Al ont confirmé l'existence de deux modes de déformation à faible température, en accord avec la littérature : un mode de déformation hétérogène qui commence avec la nucléation de dislocations à partir des surfaces de contact, et un mode de déformation homogène qui commence avec la nucléation de dislocations à partir du centre de la nanoparticule. Ces deux modes de déformation dépendent de la distribution des contraintes au sein de la nanoparticule. La température et l'orientation de l'axe de sollicitation ont des effets non négligeables sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées de Ni_3Al . Le module et la limite d'élasticité diminuent avec l'augmentation de la température. Ces deux propriétés sont moins élevées dans la direction [010], où un mode de déformation homogène peut se développer, que dans les directions [110] et [111] dans lesquelles seuls des modes de déformations hétérogènes peuvent s'activer. La température de transition d'un mode de déformation homogène vers un mode de déformation hétérogène est inférieure à 500K, quels que soient la taille et le coefficient d'arrondissement. Seuls des modes de déformation hétérogènes sont obtenus au-dessus de 500K.

Concernant les systèmes $Ni_3Al/Ni-\gamma'/\gamma$, le comportement mécanique d'un système-type contenant des renforts de forme cubique occupant une fraction volumique d'environ 50% a été étudié à différentes températures (300K, 500K, 700K et 1073K). Les simulations réalisées ont permis d'apporter une nouvelle éclairage sur le rôle déterminant joué par

l'interface entre les phases γ -Ni et γ' -Ni₃Al à travers les différences de propriétés, les contraintes et les dislocations de misfit, ainsi que leur évolution en fonction de la température. Indépendamment du sens de sollicitation, une diminution du module et de la limite d'élasticité a été constatée avec l'augmentation de la température. Cette dépendance du comportement par rapport à la température a été attribuée à l'évolution des densités de dislocations de misfit entre les phases γ -Ni et γ' -Ni₃Al sous l'effet de la température. Ces résultats sont en accord avec les études expérimentales. Par ailleurs, les simulations de traction et de compression effectuées à différentes températures mettent en évidence l'existence d'une asymétrie traction/compression sur la limite d'élasticité qui diminue avec l'augmentation de la température. Cette asymétrie traction/compression sur la limite d'élasticité a été attribuée à deux aspects :

- la quantité de dislocations mises en mouvement est plus élevée en compression qu'en traction du fait de la forme du précipité ;
- l'impact du paramètre de misfit résultant de la différence entre les paramètres de maille du précipité et de la matrice. La diminution de la valeur du paramètre de misfit en fonction de la température s'accompagne d'un effet de relaxation, lequel conduit à une diminution de la concentration de contraintes au niveau de l'interface. Ceci se manifeste par une augmentation de la densité de dislocation ainsi qu'une diminution de l'asymétrie.

De plus, la forme et la fraction volumique du renfort ont des effets non négligeables sur le comportement mécanique. À température ambiante, les changements de morphologie provoquent des variations de contraintes et de dislocations de misfit qui, à leur tour, influent sur la limite d'élasticité. Avec l'augmentation de la température, la relaxation qui s'opère au niveau de l'interface diminue l'effet de la forme. La variation de la fraction volumique des précipités s'accompagne d'une modification de la structure de dislocations de misfit, et par conséquent, influe sur le module et la limite d'élasticité.

Les études de vérification de la répétitivité des résultats effectuées en lançant chaque calcul au moins trois fois avec différentes graines aléatoires à différents taux de chargement, ont révélées que, si le module et la limite d'élasticité sont stables, la résistance mécanique, telle qu'elle est définie, varie de manière importante à la fois avec la graine aléatoire et le taux de déformation maximal fixé. Cette résistance mécanique mérite sans doute d'être redéfinie d'une autre manière.

Enfin, si dans le cas des nanoparticules de Ni₃Al isolées, les propriétés de surface-géométrie notamment pilotent le début des mécanismes de plasticité, dans celui des sys-

tèmes $Ni_3Al/Ni-\gamma'/\gamma$, ce sont les dislocations d'interface qui gouvernent l'amorçage de la plasticité.

PERSPECTIVES

Dans le cadre de cette thèse, un certain nombre de pistes ont été abordées pour tenter d'apporter des réponses aux interrogations posées à la fin de l'analyse bibliographique. Néanmoins, le travail présenté ici peut être amélioré. Pour cela, les suggestions suivantes sont proposées.

1. **Influence du modèle de champ de force à hautes températures.** L'étude menée sur l'impact du modèle de champ de force a été réalisée à température ambiante. Il serait intéressant de conduire des investigations similaires à hautes températures, afin d'élargir notre compréhension de l'effet de cet aspect de la modélisation sur les résultats obtenus en termes de comportement mécanique des nanoparticules, notamment sur l'initiation des mécanismes de plasticité.
2. **Développement d'un modèle de champ de force plus riche.** Le modèle de champ de force le plus riche de notre étude est le (*MFF*), lequel contient une partie attractive et une partie répulsive. Cependant, ce *MFF* est limité à des interactions de type paire. Autrement dit, ce champ de force est limité à l'étude du comportement mécanique de matériaux simples ne contenant qu'un seul type d'atome, tels que l'aluminium, le nickel, le cuivre, etc. Pour étudier le comportement mécanique de certains matériaux comme Ni_3Al , qui contient deux types d'atomes, il sera nécessaire de développer un autre modèle de champ de force de type multi-corps capable de décrire l'ensemble des interactions entre les types d'atomes de la nanoparticule et le mors.
3. **Amélioration de la microstructure γ/γ' .** Une microstructure simple de type $Ni_3Al/Ni-\gamma'/\gamma$ est utilisée dans le cadre de cette thèse. Pour mieux se rapprocher de la microstructure des superalliages base nickel, cette microstructure mérite d'être améliorée, notamment en termes de taille et de chimie.
4. **Étude de l'influence de l'interface.** Dans le cadre de notre étude, l'interface obtenue après l'étape de minimisation est de type semi-cohérente. Néanmoins, il sera intéressant de considérer un autre type d'interface (cohérente par exemple), afin d'étudier son effet sur le comportement mécanique; d'autant plus que, les précipités de petite taille ont souvent tendance à être cohérents avec la matrice.

5. **Morphologie des précipités.** Il serait intéressant d'approfondir les études portant sur l'effet de la morphologie des précipités en considérant plusieurs tailles et plusieurs coefficients d'arrondissement, afin de mieux caractériser l'influence de la forme sur le comportement mécanique et particulièrement sur l'asymétrie traction/compression. Des précipités de forme sphérique peuvent être également considérés; cette géométrie étant relativement commune pour les précipités de plus petite taille. Il serait également intéressant de mieux caractériser l'impact de la forme sur la variation du comportement mécanique en fonction de la fraction volumique, ceci en testant une gamme de températures plus large.
6. **Résistance mécanique et graine aléatoire.** Les calculs effectués indiquent une dépendance entre la résistance mécanique, la déformation maximale et la graine aléatoire utilisée. Les études de vérification de la répétitivité des résultats effectuées dans le cadre de cette thèse ne sont pas suffisantes pour procéder à une analyse statique complète. Il conviendrait donc d'approfondir cet aspect pour gagner en représentativité.
7. **Réaliser des études à une échelle plus grande.** En complément à cette étude qui s'appuie sur la technique de la dynamique moléculaire, très gourmande en termes de temps de calcul, et très limitée en termes de taille, la méthode de champ de phase ou celle des éléments finis pourrait être envisagées. Ceci permettrait notamment d'avoir une approche plus globale du comportement.

BIBLIOGRAPHIE

- Abuin, M., Kim, Y. Y., Runge, H., Kulkarni, S., Maier, S., Dzhigaev, D., Lazarev, S., Gelsio, L., Seitz, C., Richard, M.-I., et al. (2019). Coherent x-ray imaging of co-adsorption-induced structural changes in pt nanoparticles : implications for catalysis. *ACS Applied Nano Materials*, 2(8) :4818–4824.
- Alman, D. E. and Jablonski, P. D. (2004). Low coefficient of thermal expansion (cte) nickel base superalloys for interconnect applications in intermediate temperature solid oxide fuel cells (sofc). *Superalloys 2004*, pages 617–622.
- Amodeo, J. and Lizoul, K. (2017). Mechanical properties and dislocation nucleation in nanocrystals with blunt edges. *Materials & Design*, 135 :223–231.
- Anderson, P. M., Hirth, J. P., and Lothe, J. (2017). *Theory of dislocations*. Cambridge University Press.
- Appert, O. (2014). Sur la voie d'un véhicule particulier ne consommant que 2 litres de carburant aux 100 kilomètres. *Réalités industrielles*, (2) :80–84.
- Atlan, C., Chatelier, C., Dupraz, M., Martens, I., Viola, A., Li, N., Gao, L., Leake, S. J., Schüllli, T. U., Eymery, J., et al. (2022). Imaging the breathing of a platinum nanoparticle in electrochemical environment. *arXiv preprint arXiv :2203.06941*.
- Barrett, C. (1980). Massalski., tb structure of metals.
- Battez, A. H., González, R., Viesca, J., Fernández, J., Fernández, J. D., Machado, A., Chou, R., and Riba, J. (2008). Cu₂O, ZnO and ZnO nanoparticles as antiwear additive in oil lubricants. *Wear*, 265(3-4) :422–428.
- Begau, C., Hartmaier, A., George, E. P., and Pharr, G. M. (2011). Atomistic processes of dislocation generation and plastic deformation during nanoindentation. *Acta Materialia*, 59(3) :934–942.
- Begau, C., Hua, J., and Hartmaier, A. (2012). A novel approach to study dislocation density tensors and lattice rotation patterns in atomistic simulations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 60(4) :711–722.
- Benyoucef, M., Clement, N., and Coujou, A. (1995). Tem in situ straining of the mc2 superalloy at room temperature. *Philosophical Magazine A*, 72(4) :1043–1056.
- Bian, J., Niu, X., Zhang, H., and Wang, G. (2014). Atomistic deformation mechanisms in twinned copper nanospheres. *Nanoscale research letters*, 9(1) :335.

- Bian, J., Yang, L., Niu, X., and Wang, G. (2018a). Orientation-dependent deformation mechanisms of bcc niobium nanoparticles. *Philosophical Magazine*, 98(20) :1848–1864.
- Bian, J., Zhang, H., Niu, X., and Wang, G. (2018b). Anisotropic deformation in the compressions of single crystalline copper nanoparticles. *Crystals*, 8(3) :116.
- Bian, J.-J. and Wang, G.-F. (2013). Atomistic deformation mechanisms in copper nanoparticles. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 10(9) :2299–2303.
- Birdsall, C. K. and Langdon, A. B. (2018). *Plasma physics via computer simulation*. CRC press.
- Bisht, A., Koju, R. K., Qi, Y., Hickman, J., Mishin, Y., and Rabkin, E. (2021). The impact of alloying on defect-free nanoparticles exhibiting softer but tougher behavior. *Nature Communications*, 12(1) :2515.
- Brandes, E. A. and Brook, G. (2013). *Smithells metals reference book*. Elsevier.
- Brochard, S., Hirel, P., Pizzagalli, L., and Godet, J. (2010). Elastic limit for surface step dislocation nucleation in face-centered cubic metals : Temperature and step height dependence. *Acta Materialia*, 58(12) :4182–4190.
- Bruno, G., Schönfeld, B., and Kostorz, G. (2003). Lattice misfit in cmsx4-like nickel-base superalloys and its temperature dependence. *International Journal of Materials Research*, 94(1) :12–18.
- Buchnev, O., Podoliak, N., Frank, T., Kaczmarek, M., Jiang, L., and Fedotov, V. A. (2016). Controlling stiction in nano-electro-mechanical systems using liquid crystals. *ACS nano*, 10(12) :11519–11524.
- Caron, P. (2016). Le développement des superalliages monocristallins à base de nickel. In *Journées Annuelles de la SF2M-JA2016*.
- Caron, P. and Lavigne, O. (2011). Recent studies at onera on superalloys for single crystal turbine blades. *Aerospace Lab*, 3 :p–1.
- Carvalho, O., Buciumeanu, M., Madeira, S., Soares, D., Silva, F., and Miranda, G. (2015). Optimization of alsicnts functionally graded material composites for engine piston rings. *Materials & Design*, 80 :163–173.
- Ceal, A. and Duhl, D. (1988). Second-generation nickel-base single crystal superalloy. In *Superalloys 1988*.
- Chen, C., Shi, Y., Zhang, Y. S., Zhu, J., and Yan, Y. (2006). Size dependence of young's modulus in zno nanowires. *Physical review letters*, 96(7) :075505.
- Chen, M., Ma, E., Hemker, K. J., Sheng, H., Wang, Y., and Cheng, X. (2003). Deformation twinning in nanocrystalline aluminum. *Science*, 300(5623) :1275–1277.
- Chiu, Y. and Ngan, A. (2002). A tem investigation on indentation plastic zones in nizal (cr, b) single crystals. *Acta materialia*, 50(10) :2677–2691.

- Choi, Y., Parthasarathy, T., Dimiduk, D., and Uchic, M. (2006). Microstructural effects in modeling the flow behavior of single-crystal superalloys. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 37(3) :545–550.
- Davies, R. and Stoloff, N. (1965). On yield stress of aged ni-al alloys. *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, 233(4) :714.
- Daw, M. S. and Baskes, M. I. (1984). Embedded-atom method : Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Physical Review B*, 29(12) :6443.
- Décamps, B., Condat, M., and Morton, A. J. (1991). Comportement dissymétrique des dislocations entre traction et compression dans des superalliages base-nickel. *Microscopy Microanalysis Microstructures*, 2(6) :603–616.
- Deneen, J., Mook, W. M., Minor, A., Gerberich, W. W., and Carter, C. B. (2006). In situ deformation of silicon nanospheres. *Journal of materials science*, 41(14) :4477–4483.
- Devaux, A., Berglin, L., Thebaud, L., Delattre, R., Crozet, C., and Nodin, O. (2014). Mechanical properties and development of supersolvus heat treated new nickel base superalloy ad730tm. In *MATEC Web of Conferences*, volume 14, page 01004. EDP Sciences.
- Du, J., Wang, C., and Yu, T. (2012). Construction and application of multi-element eam potential (ni–al–re) in γ/γ' ni-based single crystal superalloys. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 21(1) :015007.
- Dubost, B. and Sainfort, P. (1991). Durcissement par précipitation des alliages d'aluminium. *Techniques de l'ingénieur. Matériaux métalliques*, M240 :M240–1.
- Dupraz, M., Li, N., Carnis, J., Wu, L., Labat, S., Chatelier, C., van de Poll, R., Hofmann, J. P., Almog, E., Leake, S. J., et al. (2022). Imaging the facet surface strain state of supported multi-faceted pt nanoparticles during reaction. *Nature Communications*, 13(1) :3003.
- Durand, M. (2021). *Analyse des mécanismes métallurgiques survenant dans l'alliage AD730TM au cours du revenu de relaxation des contraintes*. PhD thesis, Université Paris sciences et lettres.
- Durand-Charre, M. (2017). *The microstructure of superalloys*. Routledge.
- Durgun, I. and Ertan, R. (2014). Experimental investigation of fdm process for improvement of mechanical properties and production cost. *Rapid Prototyping Journal*.
- Durville, J.-L., Berthelon, J., and Trinh, Q. (2003). Calculs de stabilité des pentes : comparaison entre équilibre-limite et éléments finis dans le cas de ruptures non circulaires. *Revue française de géotechnique*, (104) :37–46.
- Dye, D., Coakley, J., Vorontsov, V., Stone, H., and Rogge, R. (2009). Elastic moduli and load partitioning in a single-crystal nickel superalloy. *Scripta materialia*, 61(2) :109–112.
- Ekinci, K. and Roukes, M. (2005). Nanoelectromechanical systems. *Review of scientific instruments*, 76(6) :061101.

- Erickson, G. (1996). The development and application of cmsx-10. *Superalloys, 1996* :35–44.
- Euler, H. (1768). *Institutiones calculi integralis, volumen primum (1768), opera omnia, vol. XI, BG Teubneri Lipsiae et Berolini, MCMXIII.*
- Fan, X., Guo, Z., Wang, X., Yang, J., and Zou, J. (2018). Morphology evolution of γ' precipitates in a powder metallurgy ni-base superalloy. *Materials Characterization, 139* :382–389.
- Fang, T.-H. and Wu, J.-H. (2008). Molecular dynamics simulations on nanoindentation mechanisms of multilayered films. *Computational Materials Science, 43(4)* :785–790.
- Fecht, H. and Furrer, D. (2000). Processing of nickel-base superalloys for turbine engine disc applications. *Advanced engineering materials, 2(12)* :777–787.
- Feruz, Y. and Mordehai, D. (2016). Towards a universal size-dependent strength of face-centered cubic nanoparticles. *Acta Materialia, 103* :433–441.
- Fink, P. J., Miller, J. L., and Konitzer, D. G. (2010). Rhenium reduction—alloy design using an economically strategic element. *Jom, 62(1)* :55–57.
- Foiles, S., Baskes, M., and Daw, M. S. (1986). Embedded-atom-method functions for the fcc metals cu, ag, au, ni, pd, pt, and their alloys. *Physical review B, 33(12)* :7983.
- Frank, F. and Read Jr, W. (1950). Multiplication processes for slow moving dislocations. *Physical Review, 79(4)* :722.
- Frøseth, A., Van Swygenhoven, H., and Derlet, P. (2004). The influence of twins on the mechanical properties of nc-al. *Acta Materialia, 52(8)* :2259–2268.
- Fujita, H. and Yamada, H. (1970). Multiplication of dislocations in aluminum. *Journal of the Physical Society of Japan, 29(1)* :132–139.
- Gades, H. and Urbassek, H. M. (1992). Pair versus many-body potentials in atomic emission processes from a cu surface. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms, 69(2-3)* :232–241.
- Gane, N. and Bowden, F. (1968). Microdeformation of solids. *Journal of Applied Physics, 39(3)* :1432–1435.
- Ganghoffer, J., Hazotte, A., Denis, S., and Simon, A. (1991). Finite element calculation of internal mismatch stresses in a single crystal nickel base superalloy. *Scripta metallurgica et materialia, 25(11)* :2491–2496.
- Gayda, J. and MacKay, R. (1989). Analysis of γ_1 shape changes in a single crystal ni-base superalloy. *Scripta metallurgica, 23(11)* :1835–1838.
- Gerberich, W. W., Mook, W., Perrey, C., Carter, C., Baskes, M., Mukherjee, R., Gidwani, A., Heberlein, J., McMurry, P. H., and Girshick, S. L. (2003). Superhard silicon nanospheres. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 51(6)* :979–992.
- Gibbons, T. and Hopkins, B. (1984). Creep behaviour and microstructure of ni-cr base alloys. *Metal Science, 18(5)* :273–280.

- Göken, M. and Kempf, M. (1999). Microstructural properties of superalloys investigated by nanoindentations in an atomic force microscope. *Acta Materialia*, 47(3) :1043–1052.
- Goodfellow, A., Galindo-Nava, E., Christofidou, K., Jones, N., Martin, T., Bagot, P., Boyer, C., Hardy, M., and Stone, H. (2018). Gamma prime precipitate evolution during aging of a model nickel-based superalloy. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 49 :718–728.
- Grant, B. M., Francis, E. M., Da Fonseca, J. Q., Daymond, M. R., and Preuss, M. (2012). Deformation behaviour of an advanced nickel-based superalloy studied by neutron diffraction and electron microscopy. *Acta materialia*, 60(19) :6829–6841.
- Groh, J., Gabb, T., Helmink, R., and Wusatowska-Sarnek, A. (2014). Development of a new cast and wrought alloy (rené 65) for high temperature disk applications. In *Proceedings of the 8th International Symposium on Superalloy 718 and Derivatives*, page 67. John Wiley & Sons.
- Grosdidier, T., Hazotte, A., and Simon, A. (1998). Precipitation and dissolution processes in γ/γ' single crystal nickel-based superalloys. *Materials Science and Engineering : A*, 256(1-2) :183–196.
- Harris, K., Erickson, G., Sikkenga, S., Brentnall, W., Aurrecochea, J., and Kubarych, K. (1993). Development of two rhenium-containing superalloys for single-crystal blade and directionally solidified vane applications in advanced turbine engines. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 2(4) :481–487.
- Harte, A., Atkinson, M., Smith, A., Drouven, C., Zaefferer, S., da Fonseca, J. Q., and Preuss, M. (2020). The effect of solid solution and gamma prime on the deformation modes in ni-based superalloys. *Acta Materialia*, 194 :257–275.
- Heredia, F. and Pope, D. (1986). The tension/compression flow asymmetry in a high γ' volume fraction nickel base alloy. *Acta Metallurgica*, 34(2) :279–285.
- Hirth, J. P., Lothe, J., and Mura, T. (1983). Theory of dislocations. *Journal of Applied Mechanics*, 50(2) :476.
- Hoover, W. G. (1985). Canonical dynamics : Equilibrium phase-space distributions. *Physical review A*, 31(3) :1695.
- Howes, P. D., Chandrawati, R., and Stevens, M. M. (2014). Colloidal nanoparticles as advanced biological sensors. *Science*, 346(6205).
- Hrutkay, K. and Kaoumi, D. (2014). Tensile deformation behavior of a nickel based superalloy at different temperatures. *Materials Science and Engineering : A*, 599 :196–203.
- Huang, S., An, K., Gao, Y., and Suzuki, A. (2018). Determination of γ/γ' lattice misfit in ni-based single-crystal superalloys at high temperatures by neutron diffraction. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 49(3) :740–751.
- Hull, D. and Bacon, D. J. (2001). *Introduction to dislocations*. Butterworth-Heinemann.

- Hultgren, R., Desai, P. D., Hawkins, D. T., Gleiser, M., and Kelley, K. K. (1973). Selected values of the thermodynamic properties of binary alloys. Technical report, National Standard Reference Data System.
- Hüther, W. and Reppich, B. (1978). Interaction of dislocations with coherent, stress-free, ordered particles. *International Journal of Materials Research*, 69(10) :628–634.
- Hwang, S., Hull, F., and Wells, J. (1984). Effects of the alloying elements on the thermal expansion coefficient of nonmagnetic ni-base alloys and austenitic steels. In *Fifth International Symposium on Superalloys, Seven Springs, PA*.
- Ichitsubo, T., Koumoto, D., Hirao, M., Tanaka, K., Osawa, M., Yokokawa, T., and Harada, H. (2003). Elastic anisotropy of rafted ni-base superalloy at high temperatures. *Acta materialia*, 51(16) :4863–4869.
- Imran, M., Hussain, F., Rashid, M., and Ahmad, S. (2012). Dynamic characteristics of nanoindentation in ni : A molecular dynamics simulation study. *Chinese Physics B*, 21(11) :116201.
- Jackson, M. and Reed, R. (1997). Heat treatment of udimet 720 li : the effect of microstructure on properties. *Advances in Turbine Materials, Design and Manufacturing*, pages 515–531.
- Jiao, F., Bettge, D., Österle, W., and Ziebs, J. (1996). Tension—compression asymmetry of the (001) single crystal nickel base superalloy sc16 under cyclic loading at elevated temperatures. *Acta materialia*, 44(10) :3933–3942.
- Jović, D. and Milićević, J. (2017). Influence of application of new material in automotive industry on improving quality of life. *Center For Quality*, pages 331–332.
- Karnthaler, H., Mühlbacher, E. T., and Rentenberger, C. (1996). The influence of the fault energies on the anomalous mechanical behaviour of ni3al alloys. *Acta Materialia*, 44(2) :547–560.
- Kawagishi, K., Yeh, A.-C., Yokokawa, T., Kobayashi, T., Koizumi, Y., and Harada, H. (2012). Development of an oxidation-resistant high-strength sixth-generation single-crystal superalloy tms-238. *Superalloys*, 9 :189–195.
- Kelly, A. and Knowles, K. M. (2020). *Crystallography and crystal defects*. John Wiley & Sons.
- Kilymis, D., Gérard, C., Amodeo, J., Waghmare, U., and Pizzagalli, L. (2018). Uniaxial compression of silicon nanoparticles : an atomistic study on the shape and size effects. *Acta Materialia*, 158 :155–166.
- Kilymis, D., Gérard, C., and Pizzagalli, L. (2019). Ductile deformation of core-shell si-sic nanoparticles controlled by shell thickness. *Acta Materialia*, 164 :560–567.
- Kim, D., Shang, S.-L., and Liu, Z.-K. (2012). Effects of alloying elements on thermal expansions of γ -ni and γ' -ni3al by first-principles calculations. *Acta materialia*, 60(4) :1846–1856.

- Kittel, C., McEuen, P., and McEuen, P. (1976). Introduction to solid state physics, 8 wiley. New York.
- Kittel, C., McEuen, P., and McEuen, P. (1996). *Introduction to solid state physics*, volume 8. Wiley New York.
- Kovarik, L., Unocic, R. R., Li, J., Sarosi, P., Shen, C., Wang, Y., and Mills, M. J. (2009). Microtwinning and other shearing mechanisms at intermediate temperatures in ni-based superalloys. *Progress in Materials Science*, 54(6) :839–873.
- Kuhn, H.-A. and Sockel, H. (1988). Comparison between experimental determination and calculation of elastic properties of nickel-base superalloys between 25 and 1200°C. *physica status solidi (a)*, 110(2) :449–458.
- Lall, C., Chin, S., and Pope, D. (1979). The orientation and temperature dependence of the yield stress of ni₃ (al, nb) single crystals. *Metallurgical Transactions A*, 10(9) :1323–1332.
- Lapin, J., Gebura, M., Bajana, O., Pelachová, T., and Nazmy, M. (2009). Effect of size and volume fraction of cuboidal gamma' precipitates on mechanical properties of single crystal nickel-based superalloy cmsx-4. *Kovove Mater*, 47(3) :129–138.
- Lennard-Jones, J. and Hall, G. (1924). Je lennard-jones proc. In *Roy. Soc. Lond. A*, volume 106, page 441.
- Li, H., Gao, S., Tomota, Y., Ii, S., Tsuji, N., and Ohmura, T. (2021). Mechanical response of dislocation interaction with grain boundary in ultrafine-grained interstitial-free steel. *Acta Materialia*, 206 :116621.
- Li, N.-L., Wu, W.-P., and Nie, K. (2018). Molecular dynamics study on the evolution of interfacial dislocation network and mechanical properties of ni-based single crystal superalloys. *Physics Letters A*, 382(20) :1361–1367.
- Link, T., Epishin, A., Klaus, M., Brückner, U., and Reznicek, A. (2005). < 1 0 0 > dislocations in nickel-base superalloys : Formation and role in creep deformation. *Materials Science and Engineering : A*, 405(1-2) :254–265.
- Loh, O. Y. and Espinosa, H. D. (2012). Nanoelectromechanical contact switches. *Nature nanotechnology*, 7(5) :283.
- Lu, F., Antonov, S., Lu, S., Zhang, J., Li, L., Wang, D., Zhang, J., and Feng, Q. (2022). Unveiling the re effect on long-term coarsening behaviors of γ' precipitates in ni-based single crystal superalloys. *Acta Materialia*, 233 :117979.
- Lv, X., Sun, F., Tong, J., Feng, Q., and Zhang, J. (2015). Paired dislocations and their interactions with γ' particles in polycrystalline superalloy gh4037. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 24(1) :143–148.
- Ma, J., Li, W., Zhang, X., Kou, H., Shao, J., Geng, P., Deng, Y., and Fang, D. (2016). Tensile properties and temperature-dependent yield strength prediction of gh4033 wrought superalloy. *Materials Science and Engineering : A*, 676 :165–172.

- Maaß, R., Meza, L., Gan, B., Tin, S., and Greer, J. R. (2012). Ultrahigh strength of dislocation-free Ni_3Al nanocubes. *Small*, 8(12) :1869–1875.
- Martel, R., Schmidt, T., Shea, H., Hertel, T., and Avouris, P. (1998). Single- and multi-wall carbon nanotube field-effect transistors. *Applied physics letters*, 73(17) :2447–2449.
- Masoumi, F., Jahazi, M., Shahriari, D., and Cormier, J. (2016). Coarsening and dissolution of γ' precipitates during solution treatment of $\text{Al-730}^{\text{TM}}$ Ni-based superalloy : Mechanisms and kinetics models. *Journal of Alloys and Compounds*, 658 :981–995.
- Mauer, F., Munro, R., Piermarini, G., Block, S., and Dandekar, D. (1985). Compression studies of a nickel-based superalloy, mar-m200, and of Ni_3Al . *Journal of applied physics*, 58(10) :3727–3730.
- Midolo, L., Schliesser, A., and Fiore, A. (2018). Nano-opto-electro-mechanical systems. *Nature nanotechnology*, 13(1) :11–18.
- Miner, R., Gabb, T., Gayda, J., and Hemker, K. (1986). Orientation and temperature dependence of some mechanical properties of the single-crystal nickel-base superalloy René 4 : Part iii. tension-compression anisotropy. *Metallurgical transactions A*, 17(3) :507–512.
- Miodownik, P., Schille, J.-P., Saunders, N., Guo, Z., and Li, X. (2004). Modelling the material properties and behaviour of Ni-based superalloys. In *Superalloys 2004*, pages 849–858.
- Mishin, Y. (2004). Atomistic modeling of the γ and γ' -phases of the Ni–Al system. *Acta Materialia*, 52(6) :1451–1467.
- Mishin, Y., Farkas, D., Mehl, M., and Papaconstantopoulos, D. (1999). Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations. *Physical Review B*, 59(5) :3393.
- Mishin, Y., Mehl, M., Papaconstantopoulos, D., Voter, A., and Kress, J. (2001). Structural stability and lattice defects in copper : Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations. *Physical Review B*, 63(22) :224106.
- Mo, Y., Turner, K. T., and Szlufarska, I. (2009). Friction laws at the nanoscale. *Nature*, 457(7233) :1116–1119.
- Mordehai, D., Kazakevich, M., Srolovitz, D. J., and Rabkin, E. (2011). Nanoindentation size effect in single-crystal nanoparticles and thin films : A comparative experimental and simulation study. *Acta Materialia*, 59(6) :2309–2321.
- Morse, P. M. (1929a). Diatomic molecules according to the wave mechanics. ii. vibrational levels. *Physical review*, 34(1) :57.
- Morse, P. M. (1929b). Diatomic molecules according to the wave mechanics. ii. vibrational levels. *Physical Review*, 34 :57.
- Mryasov, O., Gornostyrev, Y. N., Van Schilfgaarde, M., and Freeman, A. (2002). Superdislocation core structure in $\text{Al-12 Ni}_3\text{Al}$, Ni_3Ge and Fe_3Ge : Peierls–Nabarro analysis starting from ab-initio GSF energetics calculations. *Acta materialia*, 50(18) :4545–4554.

- Mughrabi, H. (2014). The importance of sign and magnitude of γ/γ' lattice misfit in superalloys—with special reference to the new γ' -hardened cobalt-base superalloys. *Acta materialia*, 81 :21–29.
- Müller, L., Glatzel, U., and Feller-Kniepmeier, M. (1992). Modelling thermal misfit stresses in nickel-base superalloys containing high volume fraction of γ' phase. *Acta metallurgica et materialia*, 40(6) :1321–1327.
- Murakumo, T., Kobayashi, T., Koizumi, Y., and Harada, H. (2004). Creep behaviour of ni-base single-crystal superalloys with various γ' volume fraction. *Acta Materialia*, 52(12) :3737–3744.
- Murr, L. E. (1975). Interfacial phenomena in metals and alloys.
- Nathal, M., Mackay, R., and Garlick, R. (1985). Temperature dependence of γ - γ' lattice mismatch in nickel-base superalloys. *Materials Science and Engineering*, 75(1-2) :195–205.
- Neumeier, S., Pyczak, F., and Göken, M. (2021). The temperature dependent lattice misfit of rhenium and ruthenium containing nickel-base superalloys—experiment and modelling. *Materials & Design*, 198 :109362.
- Ng, C., Ash, B., Schadler, L., and Siegel, R. (2001). A study of the mechanical and permeability properties of nano-and micron-tio2 filled epoxy composites. *Advanced Composites Letters*, 10(3) :096369350101000301.
- Nicolay, A. (2019). *Microstructure et propriétés de l'Inconel 718 DA forgé en presse à vis dans le domaine subsolvus δ* . PhD thesis, Université Paris sciences et lettres.
- Nowak, J., Beaber, A., Ugurlu, O., Girshick, S. L., and Gerberich, W. W. (2010). Small size strength dependence on dislocation nucleation. *Scripta Materialia*, 62(11) :819–822.
- Osawa, M., Shiraishi, H., Yokokawa, T., Harada, H., and Kobayashi, T. (2004). 3d-fem calculations of rafting in ni-base superalloys based on high temperature elastic and lattice parameters. In *The 10th international symposium on superalloys. Minerals, Metals & Materials Society, Warrendale, PA*, pages 977–985.
- Peng, P., Liao, G., Shi, T., Tang, Z., and Gao, Y. (2010). Molecular dynamic simulations of nanoindentation in aluminum thin film on silicon substrate. *Applied Surface Science*, 256(21) :6284–6290.
- Plimpton, S. (1995). Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of computational physics*, 117(1) :1–19.
- Pollock, T. and Argon, A. (1994). Directional coarsening in nickel-base single crystals with high volume fractions of coherent precipitates. *Acta metallurgica et materialia*, 42(6) :1859–1874.
- Pollock, T. M. and Tin, S. (2006). Nickel-based superalloys for advanced turbine engines : chemistry, microstructure and properties. *Journal of propulsion and power*, 22(2) :361–374.

- Pope, D. and Ezz, S. S. (1984). Mechanical properties of ni3ai and nickel-base alloys with high volume fraction of γ' . *International metals reviews*, 29(1) :136–167.
- Prakash, A., Guérolé, J., Wang, J., Müller, J., Spiecker, E., Mills, M. J., Povstugar, I., Choi, P., Raabe, D., and Bitzek, E. (2015). Atom probe informed simulations of dislocation–precipitate interactions reveal the importance of local interface curvature. *Acta Materialia*, 92 :33–45.
- Pyczak, F., Bauer, A., Göken, M., Lorenz, U., Neumeier, S., Oehring, M., Paul, J., Schell, N., Schreyer, A., Stark, A., et al. (2015). The effect of tungsten content on the properties of γ' -hardened co–al–w alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, 632 :110–115.
- Radis, R., Schaffer, M., Albu, M., Kothleitner, G., Pölt, P., and Kozeschnik, E. (2009). Multimodal size distributions of γ' precipitates during continuous cooling of udimet 720 li. *Acta Materialia*, 57(19) :5739–5747.
- Reed, R. (2006). *The superalloys fundamentals and application*. Cambridge, UK.
- Reed, R. C. (2008). *The superalloys : fundamentals and applications*. Cambridge university press.
- Richardson, T. (1987). *Composites : a design guide*. Industrial Press Inc, 200 Madison Ave, New York, New York 10016, USA, 1987. 343.
- Ricks, R., Porter, A., and Ecob, R. (1983). The growth of γ' precipitates in nickel-base superalloys. *Acta Metallurgica*, 31(1) :43–53.
- Ross, E. W. and O'Hara, K. S. (1996). René n4 : A first generation single crystal turbine air-foil alloy with improved oxidation resistance, low angle boundary strength and superior long time rupture strength. *Superalloys 1996*, pages 19–25.
- Royer, A., Bastie, P., Bellet, D., and Strudel, J. (1995). Temperature dependence of the lattice mismatch of the am1 superalloy influence of the γ' 'precipitates' morphology. *Philosophical Magazine A*, 72(3) :669–689.
- Saber-Samandari, S. and Afaghi-Khatibi, A. (2007). Evaluation of elastic modulus of polymer matrix nanocomposites. *Polymer composites*, 28(3) :405–411.
- Salah, S. B. H. (2018). *Plasticité des nanoparticules métalliques Cubiques á Faces Centrées*. PhD thesis, ISAE-ENSMA Ecole Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique-Poitiers.
- Salah, S. B. H., Gerard, C., and Pizzagalli, L. (2017). Influence of surface atomic structure on the mechanical response of aluminum nanospheres under compression. *Computational Materials Science*, 129 :273–278.
- Sato, A., Harada, H., Yeh, A.-C., Kawagishi, K., Kobayashi, T., Koizumi, Y., Yokokawa, T., and Zhang, J. (2008). A 5th generation sc superalloy with balanced high temperature properties and processability. *Superalloys*, 2008 :131–138.

- Sato, A., Yeh, A.-C., Kobayashi, T., Yokokawa, T., Harada, H., Murakumo, T., and Zhang, J. (2007). Fifth generation ni based single crystal superalloy with superior elevated temperature properties. *Energy materials*, 2(1) :19–25.
- Sato, J., Omori, T., Oikawa, K., Ohnuma, I., Kainuma, R., and Ishida, K. (2006). Cobalt-base high-temperature alloys. *Science*, 312(5770) :90–91.
- Savitzky, A. and Golay, M. J. (1964). Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. *Analytical chemistry*, 36(8) :1627–1639.
- Sawant, A. and Tin, S. (2008). High temperature nanoindentation of a re-bearing single crystal ni-base superalloy. *Scripta materialia*, 58(4) :275–278.
- Schloesser, J., Rösler, J., and Mukherji, D. (2011). Deformation behaviour of freestanding single-crystalline ni₃Al-based nanoparticles. *International journal of materials research*, 102(5) :532–537.
- Schoeck, G., Kohlhammer, S., and Fahnle, M. (1999). Planar dissociations and recombination energy of [110] superdislocations in ni₃Al : Generalized peierls model in combination with ab initio electron theory. *Philosophical magazine letters*, 79(11) :849–857.
- Senkov, O., Woodward, C., and Miracle, D. (2014). Microstructure and properties of aluminum-containing refractory high-entropy alloys. *Jom*, 66 :2030–2042.
- Seo, J.-H., Park, H. S., Yoo, Y., Seong, T.-Y., Li, J., Ahn, J.-P., Kim, B., and Choi, I.-S. (2013). Origin of size dependency in coherent-twin-propagation-mediated tensile deformation of noble metal nanowires. *Nano letters*, 13(11) :5112–5116.
- Shah, D. and Duhl, D. (1984). The effect of orientation, temperature and gamma prime size on the yield strength of a single crystal nickel base superalloy. *Superalloys. The Metallurgical Society of AIME*, pages 105–114.
- Shreiber, K. and Mordehai, D. (2015). Dislocation-nucleation-controlled deformation of ni₃Al nanocubes in molecular dynamics simulations. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 23(8) :085004.
- Siebörger, D., Knake, H., and Glatzel, U. (2001). Temperature dependence of the elastic moduli of the nickel-base superalloy cmsx-4 and its isolated phases. *Materials Science and Engineering : A*, 298(1-2) :26–33.
- Simmons, G., Wang, H., et al. (1971). Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties.
- Singh, A., Nag, S., Chattopadhyay, S., Ren, Y., Tiley, J., Viswanathan, G., Fraser, H., and Banerjee, R. (2013). Mechanisms related to different generations of γ' precipitation during continuous cooling of a nickel base superalloy. *Acta Materialia*, 61(1) :280–293.
- Smithells, C. J. (2013). *Metals reference book*. Elsevier.

- Sondhi, S., Dyson, B., and McLean, M. (2004). Tension–compression creep asymmetry in a turbine disc superalloy : roles of internal stress and thermal ageing. *Acta materialia*, 52(7) :1761–1772.
- Spearot, D. E., Jacob, K. I., and McDowell, D. L. (2007). Dislocation nucleation from bicrystal interfaces with dissociated structure. *International Journal of Plasticity*, 23(1) :143–160.
- Srinivasan, R., Eggeler, G., and Mills, M. (2000). γ' -cutting as rate-controlling recovery process during high-temperature and low-stress creep of superalloy single crystals. *Acta Materialia*, 48(20) :4867–4878.
- Staton-Bevan, A. E. and Rawlings, R. D. (1975). Dislocation structures in deformed single-crystal ni₃ (al, ti). *Philosophical Magazine*, 32(4) :787–800.
- Stukowski, A. (2009). Visualization and analysis of atomistic simulation data with ovito—the open visualization tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1) :015012.
- Sugui, T., Huihua, Z., Jinghua, Z., Hongcai, Y., Yongbo, X., and Zhuangqi, H. (2000). Formation and role of dislocation networks during high temperature creep of a single crystal nickel–base superalloy. *Materials Science and Engineering : A*, 279(1-2) :160–165.
- Sumita, M., Ookuma, T., Miyasaka, K., and Ishikawa, K. (1982). Effect of ultra fine particles on the elastic properties of oriented polypropylene composites. *Journal of Materials Science*, 17(10) :2869–2877.
- Sumita, M., Shizuma, T., Miyasaka, K., and Ishikawa, K. (1984). Reducible properties of draw temperature, rate of strain and filler content in tensile yield stress of polymethylmethacrylate filled with ultrafine particles. *Rheologica acta*, 23(4) :396–400.
- Sundaram, M. and Mahamani, A. (2015). Development of carbon nanotube reinforced aluminum matrix composite brake drum for automotive applications. *Research and Innovation in Carbon Nanotube-Based Composites*, Dr. Brahim Attaf (Ed.).
- Swope, W. C., Andersen, H. C., Berens, P. H., and Wilson, K. R. (1982). A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules : Application to small water clusters. *The Journal of chemical physics*, 76(1) :637–649.
- Taylor, B. (1715). *Methodus incrementorum directa & inversa*. typis Pearsonianis : prostant apud Gul. Innys.
- Texier, M., Merabet, A., Tromas, C., Brochard, S., Pizzagalli, L., Thilly, L., Rabier, J., Talneau, A., Le Vaillant, Y., Thomas, O., et al. (2019). Plastic behaviour and deformation mechanisms in silicon nano-objects. In *Journal of Physics : Conference Series*, volume 1190, page 012004. IOP Publishing.
- Thilly, L., Ghisleni, R., Swistak, C., and Michler, J. (2012). In situ deformation of micro-objects as a tool to uncover the micro-mechanisms of the brittle-to-ductile transition in semiconductors : the case of indium antimonide. *Philosophical Magazine*, 92(25-27) :3315–3325.

- Thornton, P. (1970). R. G. Davies, and T. L. Johnston. *Metall. Trans*, 1 :207–218.
- Trunfio Sfarghiu, A.-M. (2006). *Modèle bio-tribologique des articulations : rôle mécanique et physicochimique des assemblages moléculaires du fluide synovial*. PhD thesis, Lyon, INSA.
- Tsuno, N., Shimabayashi, S., Kakehi, K., Rae, C., and Reed, R. (2008). Tension/compression asymmetry in yield and creep strengths of Ni-based superalloys. *Superalloys*, 2008 :433–442.
- Van Sluytman, J. and Pollock, T. (2012). Optimal precipitate shapes in nickel-base γ - γ' alloys. *Acta Materialia*, 60(4) :1771–1783.
- Vattré, A., Devincere, B., and Roos, A. (2010). Orientation dependence of plastic deformation in nickel-based single crystal superalloys : Discrete–continuous model simulations. *Acta Materialia*, 58(6) :1938–1951.
- Vergeles, M., Maritan, A., Koplik, J., and Banavar, J. R. (1997). Adhesion of solids. *Physical Review E*, 56(3) :2626.
- Verlet, L. (1967). Computer "experiments" on classical fluids. i. thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Physical Review*, 159(1) :98.
- Versnyder, F. I. and Shank, M. (1970). The development of columnar grain and single crystal high temperature materials through directional solidification. *Materials Science and Engineering*, 6(4) :213–247.
- Veyssi re, P. and Saada, G. (1996). Microscopy and plasticity of the L12 γ phase. In *Dislocations in Solids*, volume 10, pages 253–441. Elsevier.
- V lkl, R., Glatzel, U., and Feller-Kniepmeier, M. (1998). Measurement of the lattice misfit in the single crystal nickel based superalloys CMSX-4, SRR99 and SC16 by convergent beam electron diffraction. *Acta Materialia*, 46(12) :4395–4404.
- Voter, A. F. and Chen, S. P. (1986). Accurate interatomic potentials for Ni, Al and Ni₃Al. *MRS Online Proceedings Library (OPL)*, 82.
- Wagner, A. J., Hintsala, E. D., Kumar, P., Gerberich, W. W., and Mkhoyan, K. A. (2015). Mechanisms of plasticity in near-theoretical strength sub-100 nm Si nanocubes. *Acta Materialia*, 100 :256–265.
- Walston, S., Cetel, A., MacKay, R., Ohara, K., Duhl, D., and Dreshfield, R. (2004). Joint development of a fourth generation single crystal superalloy. *NASA/TM-2004-213062*.
- Walston, W., O'hara, K., Ross, E., Pollock, T., and Murphy, W. (1996). Renfi n6 : Third generation single crystal superalloy. *Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA* 15213.
- Wang, B., Liu, D., Wen, Z., and Yue, Z. (2014a). Tension/compression asymmetry of [001] single-crystal nickel-based superalloy DD6 during low cycle fatigue. *Materials Science and Engineering : A*, 593 :31–37.

- Wang, G., Bian, J., Feng, J., and Feng, X. (2014b). Compressive behavior of crystalline nanoparticles with atomic-scale surface steps. *Materials Research Express*, 2(1) :015006.
- Wang, J., Zhou, L., Sheng, L., and Guo, J. (2012). The microstructure evolution and its effect on the mechanical properties of a hot-corrosion resistant ni-based superalloy during long-term thermal exposure. *Materials & Design*, 39 :55–62.
- Wang, W., Jiang, C., and Lu, K. (2003). Deformation behavior of ni3al single crystals during nanoindentation. *Acta materialia*, 51(20) :6169–6180.
- Weast, R. C., Suby, S., and Hodman, C. (1984). Handbook of chemistry and physics. 64. Aufl. (CRC-PRESS, Boca Raton, FL, 1985).
- Wen, Z., Pei, H., Wang, B., Zhang, D., and Yue, Z. (2016). The tension/compression asymmetry of a high γ' volume fraction nickel-based single-crystal superalloy. *Materials at High Temperatures*, 33(1) :68–74.
- Wlodek, S., Kelly, M., and Alden, D. (1996). The structure of rene 88 dt. *Superalloys*, 1996 :129–136.
- Wosik, J., Dubiel, B., Czyrska-Filemonowicz, A., Penkalla, H., Szot, K., and Schubert, F. (2001). Quantitative characterisation of waspaloy microstructure using various microscopic techniques. *SONDERBANDE DER PRAKTISCHEN METALLOGRAPHIE*, pages 87–90.
- Wu, W.-P., Guo, Y.-F., Wang, Y.-S., Mueller, R., and Gross, D. (2011). Molecular dynamics simulation of the structural evolution of misfit dislocation networks at γ/γ' phase interfaces in ni-based superalloys. *Philosophical Magazine*, 91(3) :357–372.
- Wu, X., Liao, X., Srinivasan, S., Zhou, F., Lavernia, E., Valiev, R., and Zhu, Y. (2008). New deformation twinning mechanism generates zero macroscopic strain in nanocrystalline metals. *Physical review letters*, 100(9) :095701.
- Wukusick, C. (2000). Lb jr. *Property-balanced Nickel-Base superalloys for Producing Single Crystal*.
- Xie, H.-X., Bo, L., and Yu, T. (2012). Atomistic simulation of microtwinning at the crack tip in l12 ni3al. *Philosophical Magazine*, 92(12) :1542–1553.
- Xiong, K., Lu, H., and Gu, J. (2016). Atomistic simulations of the nanoindentation-induced incipient plasticity in ni3al crystal. *Computational Materials Science*, 115 :214–226.
- Yamakov, V., Wolf, D., Phillpot, S. R., Mukherjee, A. K., and Gleiter, H. (2002). Dislocation processes in the deformation of nanocrystalline aluminium by molecular-dynamics simulation. *Nature materials*, 1(1) :45–49.
- Yanqiu, Y., Zhixun, W., Yanchao, Z., Jiapo, W., Zhenwei, L., and Zhufeng, Y. (2020). Effect of crystallographic orientation on the corrosion resistance of ni-based single crystal superalloys. *Corrosion Science*, 170 :108643.

- Yashiro, K., Naito, M., and Tomita, Y. (2002). Molecular dynamics simulation of dislocation nucleation and motion at γ/γ interface in ni-based superalloy. *International journal of mechanical sciences*, 44(9) :1845–1860.
- Zamani, M., Amadeh, A., and Baghal, S. L. (2016). Effect of co content on electrodeposition mechanism and mechanical properties of electrodeposited ni-co alloy. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 26(2) :484–491.
- Zhang, D., Niu, W., Cao, X., and Liu, Z. (2015). Effect of standard heat treatment on the microstructure and mechanical properties of selective laser melting manufactured inconel 718 superalloy. *Materials Science and Engineering : A*, 644 :32–40.
- Zhang, H. K., Yao, Z., Kirk, M. A., and Daymond, M. R. (2014). Stability of ni₃ (al, ti) gamma prime precipitates in a nickel-based superalloy inconel x-750 under heavy ion irradiation. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 45(8) :3422–3428.
- Zhang, J., Harada, H., Koizumi, Y., and Kobayashi, T. (2010). Dislocation motion in the early stages of high-temperature low-stress creep in a single-crystal superalloy with a small lattice misfit. *Journal of materials science*, 45(2) :523–532.
- Zhang, L., Zhao, L., Roy, A., Silberschmidt, V., and Mccolvin, G. (2019). Low-cycle fatigue of single crystal nickel-based superalloy—mechanical testing and tem characterisation. *Materials Science and Engineering : A*, 744 :538–547.
- Zhang, P., Zhang, L., Zhu, Q., Chen, G., Wang, C., Fan, G., and Qin, H. (2022). Interfacial dislocation evolution and yield mechanism of nickel-based single crystal superalloy : A molecular dynamics research. *Materials Today Communications*, 32 :104006.
- Zhao, X., Liu, L., Yu, Z., Zhang, W., and Fu, H. (2010). Microstructure development of different orientated nickel-base single crystal superalloy in directional solidification. *Materials characterization*, 61(1) :7–12.
- Zhu, Y., Li, Z., and Huang, M. (2013). Atomistic modeling of the interaction between matrix dislocation and interfacial misfit dislocation networks in ni-based single crystal superalloy. *Computational materials science*, 70 :178–186.
- Ziegenhain, G., Hartmaier, A., and Urbassek, H. M. (2009). Pair vs many-body potentials : Influence on elastic and plastic behavior in nanoindentation of fcc metals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57(9) :1514–1526.

ANNEXES

Dans cette partie annexe, il est indiqué des résultats complémentaires effectués dans le cadre de cette thèse, qui ne sont pas présentés dans les chapitres précédents. L'objectif est de donner plus de détails sur certains résultats, tels que ceux obtenus en étudiant l'impact du modèle de champ de force, ou ceux présentés sur la méthodologie, ou encore ceux obtenus en étudiant le comportement mécanique des matériaux à hautes températures.

IMPACT DU MODÈLE DE CHAMP DE FORCE SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES NANOPARTICULES ISOLÉES

L'étude de l'impact du modèle de champ de force présenté dans la section 2 du chapitre 2 a été effectuée en considérant deux matériaux (aluminium-Al et le nickel-Ni) et trois modèles de champ de force (*IFF*, *MFF* et *RMF*). Les nanoparticules d'Al ont été sollicitées suivant six orientations cristallographiques ([010], [110], [111], [120], [211] et [123]), tandis que celles de Ni ont été comprimées selon deux directions de chargement ([010] et [211]).

COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES NANOPARTICULES D'ALUMINIUM

Pour les nanoparticules d'Al, les comportements mécaniques dans les six orientations cristallographiques, de même que les mécanismes de plasticité dans les directions [010], [110], [120], [211] ont été présentés et discutés dans la section 2 du chapitre 2. L'étude de l'impact du modèle de champ de force a montré que des comportements similaires sont obtenus dans les directions [010], [111] et [123]. En complément du mécanisme de plasticité selon la direction [010], présenté dans la section 2 du chapitre 2, les mécanismes de plasticité dans les directions [111] et [123] sont donnés respectivement aux Figures A.1 et A.2.

Dans la direction [111], le même mécanisme de plasticité est obtenu pour les modèles *IFF* et *RMF*. Ce mécanisme de plasticité observé avec les modèles *IFF* et *RMF* est comparé avec celui constaté avec le modèle *MFF*, en considérant à la fois les mêmes incréments de déplacement (partant du début de la nucléation), et des niveaux de déplacement similaires. Le mécanisme de plasticité débute à un niveau de chargement plus élevé avec les

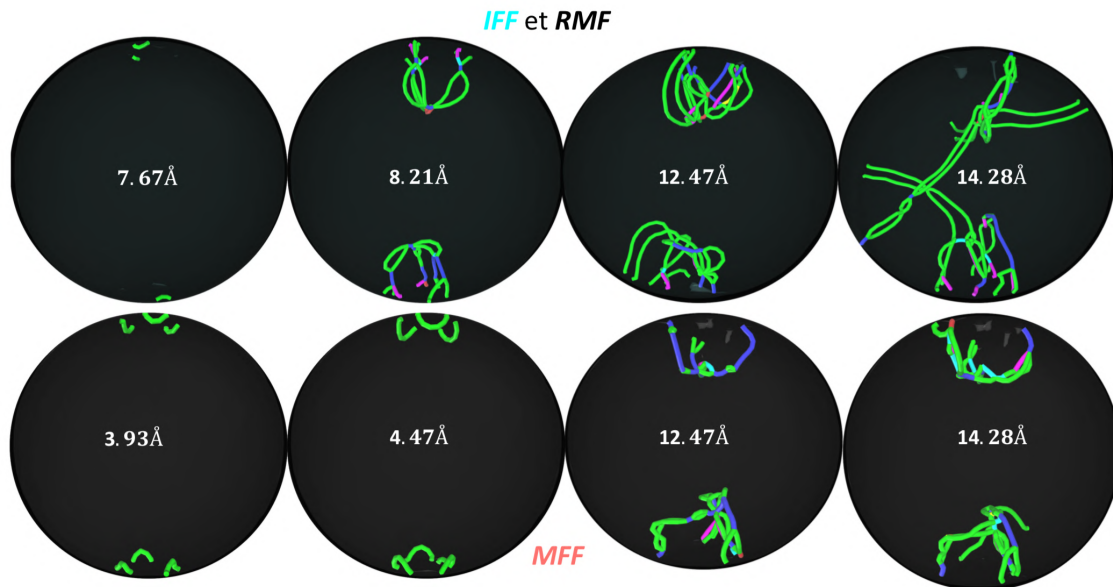


FIGURE A.1 – Impact du modèle de champ de force sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées d’Al à température ambiante : évolution du mécanisme de plasticité obtenu avec les modèles IFF et RMF (les quatre images en haut) ; et celui obtenu avec le modèle MFF (les quatre images en bas) selon la direction $[111]$ (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).

modèles IFF et RMF qu’avec le modèle MFF (7.67 Å avec les modèles IFF et RMF, contre 3.93 Å pour le modèle MFF). À ces niveaux de déplacement, la génération de dislocations partielles de Shockley est observée pour tous les modèles. Lorsque l’incrément de déplacement est augmenté de 0.54 Å, avec les modèles IFF et RMF, une structure tétraédrique se forme, suite à l’interception des dislocations générées. À ce niveau d’incrément de déplacement, cette structure n’est pas observée avec le modèle MFF ; donc ce dernier enregistre un retard par rapport aux modèles IFF et RMF. Si l’incrément de déplacement passe de 0.54 Å à 8.55 Å, avec les modèles IFF et RMF, il est constaté la destruction de la structure tétraédrique, du fait de la dissociation et du détachement des dislocations, qui vont migrer vers le centre de la nanoparticule. La structure qui s’est formée avec le MFF reste non détruite à ce niveau de chargement. Ceci montre que le mécanisme de plasticité obtenu avec le modèle MFF évolue de manière plus lente que celui obtenu avec les modèles IFF et RMF.

En augmentant le niveau de déplacement, tout en considérant cette fois les mêmes niveaux de chargement (14.28 Å pour tous les modèles), en confirmation de l’effet retard souligné dans le paragraphe précédent, il est observé que le mécanisme de plasticité obtenu avec les modèles IFF et RMF est dans un état plus avancé que celui obtenu avec le modèle

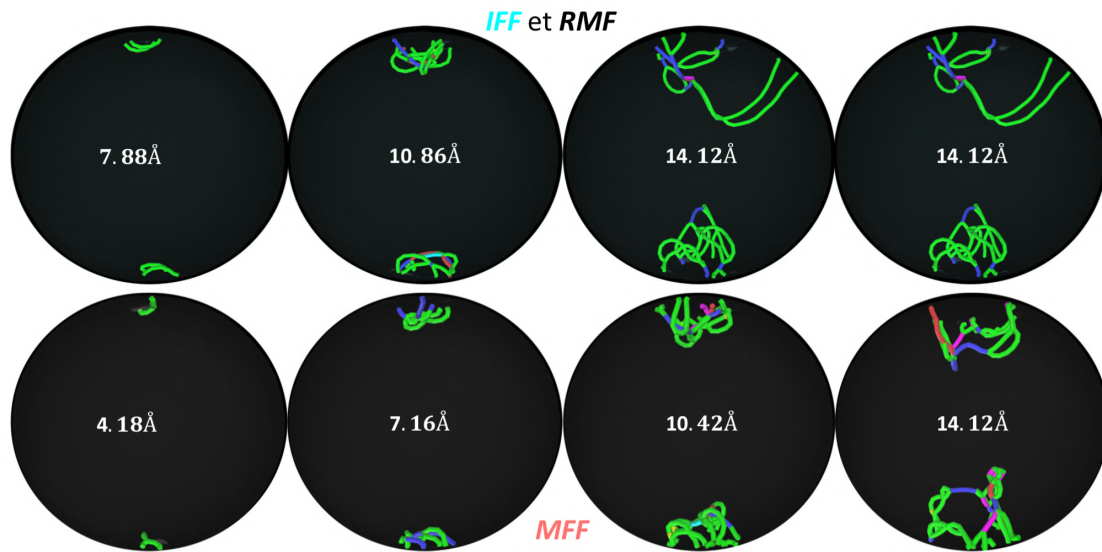


FIGURE A.2 – Impact du modèle de champ de force sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées d’Al à température ambiante : évolution du mécanisme de plasticité obtenu avec les modèles IFF et RMF (les quatre images en haut) ; et celui obtenu avec le modèle MFF (les quatre images en bas) selon la direction $[123]$ (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).

MFF (Figure A.1).

Dans la direction $[123]$ (Figure A.2), les mêmes tendances obtenues dans la direction $[111]$ sont observées sur l’évolution des mécanismes de plasticité, c’est-à-dire, des mécanismes de plasticité similaires marqués par un effet de retard du modèle MFF par rapport aux modèles IFF et RMF. Les comparaisons sont effectuées en considérant à la fois les mêmes niveaux d’incrément de déplacement (en partant du début des événements plastiques), mais aussi en considérant les mêmes niveaux de déplacement.

Comme les mécanismes de plasticité obtenus avec les modèles IFF et RMF sont les mêmes dans les directions $[111]$ et $[123]$, par rapport à ces derniers, le retard enregistré avec le modèle MFF est attribué à sa partie attractive. En effet, du fait de cette dernière, les dislocations ont plus de mal à se détacher, et donc à glisser facilement vers le centre où la surface de la nanoparticule, comme il est observé avec les modèles IFF et RMF.

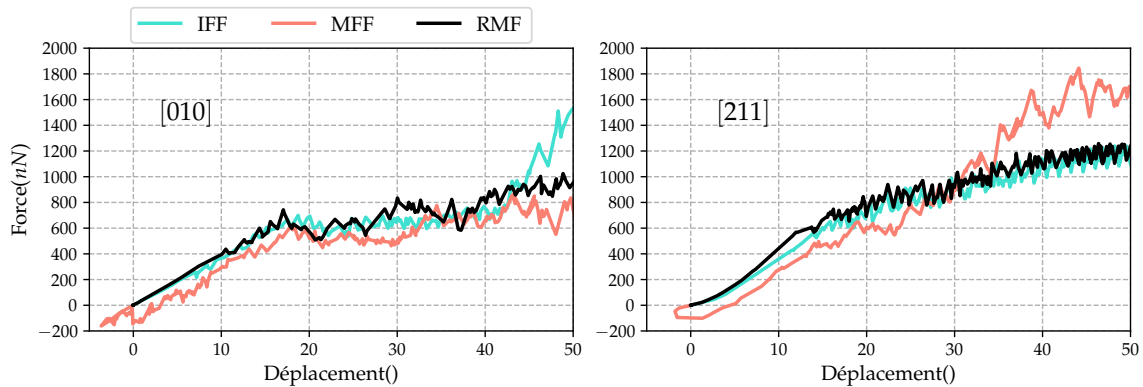


FIGURE A.3 – Impact du modèle de champ de force sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées de nickel à température ambiante : comportements mécaniques obtenus avec les modèles *IFF*, *RMF* et *MFF* selon les directions $[010]$ et $[211]$.

COMPORTEMENT MÉCANIQUE DES NANOPARTICULES DE NICKEL

Concernant les nanoparticules de Ni, les comportements mécaniques obtenus dans les directions $[010]$ et $[211]$ sont présentés à la Figure 2. L'analyse des courbes de chargement montre que, si dans la direction $[010]$ des comportements similaires sont obtenus quel que soit le champ de force, dans la direction $[211]$, un durcissement plus important avec le modèle *MFF* par rapport aux modèles *IFF* et *RMF* est observé. Il doit être rappelé que, des tendances similaires ont été aussi observées avec les nanoparticule d'Al, suivant les mêmes directions.

Concernant les mécanismes plasticité, dans la direction $[010]$, les résultats présentés à la section 2 du chapitre 2 ont montré que des mécanismes de plasticité similaires sont obtenus avec les modèles *IFF* et *RMF*. Par contre, le début du mécanisme de plasticité constaté avec le modèle *MFF* présente des différences comparé aux modèles *IFF* et *MFF*.

Dans la direction $[211]$, une tendance similaire que celle observée avec les nanoparticules d'Al est obtenue avec les nanoparticules de Ni. Le mécanisme de plasticité est présenté à la Figure A.4. Comme il a été observé avec les nanoparticules d'aluminium, le mécanisme de plasticité dans cette direction est dominé par du maclage du fait de sa géométrie de surface. Avec les modèles *IFF* et *RMF*, les mêmes mécanismes de plasticité ont été obtenus. Donc, pour simplification, ces deux modèles sont regroupés, et comparés au modèle *MFF*. Les comparaisons sont effectuées en considérant des niveaux de déplacement similaires. Pour tous les modèles, le mécanisme de plasticité commence avec de la nucléation de dislocations partielles de Shockley, qui laissent derrière elles des défauts d'empilement étendus, favorisant la création de joints de macle. Avec l'augmentation du chargement, les joints de macle formés au niveau des endroits proches des zones de contact entre le champ

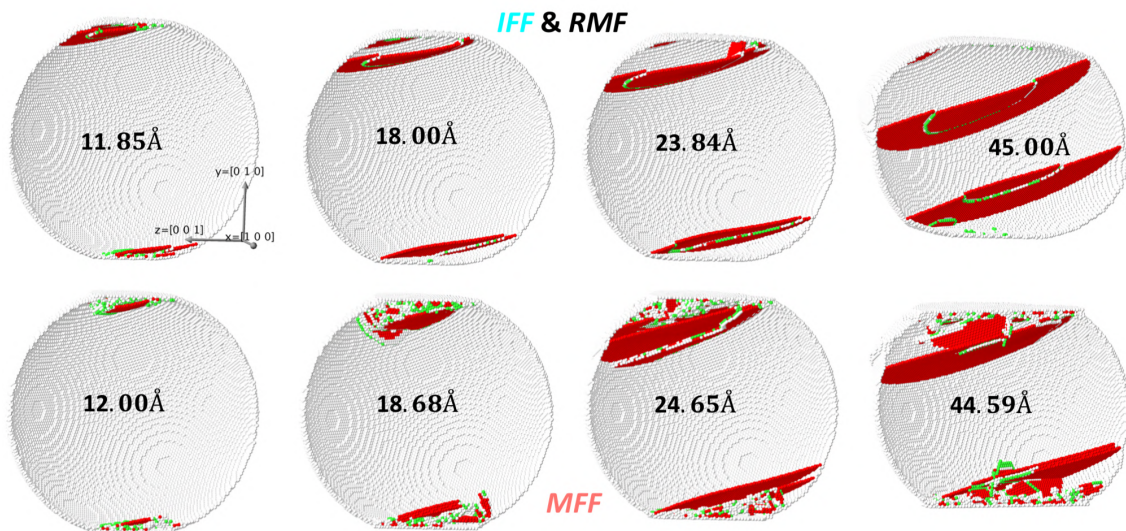


FIGURE A.4 – Impact du modèle de champ de force sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées de nickel à température ambiante : évolution du mécanisme de plasticité obtenu avec les modèles *IFF* et *RMF* (les quatre images en haut) ; et celui obtenu avec le modèle *MFF* (les quatre images en bas) selon la direction $[211]$.

de force et la nanoparticule vont migrer vers le centre de cette dernière. Avec les modèles *IFF* et *RMF*, lors de cette migration, il est observé derrière les joints de macles un réseau (*CFC*) parfait. Cependant, avec le modèle *MFF*, il se forment des structures de dislocations derrière les joints de macles lors de leur migration vers le centre de la nanoparticule. La présence de ces dislocations explique le fait qu'il est constaté un durcissement plus prononcé avec le modèle *MFF*, qu'avec les modèles *IFF* et *RMF*.

Du fait de sa partie attractive, les dislocations observées dans le mécanisme de plasticité obtenu avec le *MFF* sont piégées par ce dernier. Par conséquent, les dislocations, ayant du mal à s'échapper, restent bloquées derrière les joints de macles, favorisant un durcissement accru en comparaison de ceux observés avec les modèles *IFF* et *RMF*.

IMPACT DE LA MÉTHODE DE THERMALISATION SUR LE COMPORTEMENT MÉCANIQUE

L'étude du comportement mécanique des systèmes γ/γ' - Ni_3Al/Ni en fonction de la température a été effectuée en prenant en compte l'influence de plusieurs paramètres tels que l'impact du chemin suivi par la température lors de la thermalisation, l'impact du temps de stabilisation, l'impact de la graine aléatoire (random seed), etc. L'étude de l'impact du chemin suivi par la température lors de la thermalisation a été réalisée à 300K, tandis que celle de l'impact du temps de stabilisation est fait à 1073K. L'influence du random seed est évaluée pour toutes les températures.

THERMALISATION À 300K ET À 1073K

Deux chemins (présentés dans la section 4 du chapitre 4) ont été empruntés pour amener le système à une température de 300K. Avec la première méthode (nommée 300K – M1), le système est chauffé jusqu'à une température de 300K pendant une durée de 15ps, puis est stabilisé durant 15ps. Pour la seconde méthode (nommée 300K – M2), le système est chauffé jusqu'à une température de 500K pendant une durée de 18ps, stabilisé pendant 15ps, avant d'être refroidi et stabilisé à une température de 300K pendant une durée de 47ps. Des tests de traction et de compression sont ensuite réalisés sur les microstructures obtenues à la fin de chaque étape de thermalisation (Figure B.1). En comparant les résultats obtenus selon la méthode de thermalisation utilisée, on peut dire que des comportements élastiques similaires sont obtenus indépendamment de la direction de sollicitation. Cependant, si en compression, les comportements plastiques restent similaires quelle que soit la méthode de thermalisation, en traction, des limites d'élasticité et des résistances mécaniques différentes sont obtenues. À noter que, si la variation observée sur la

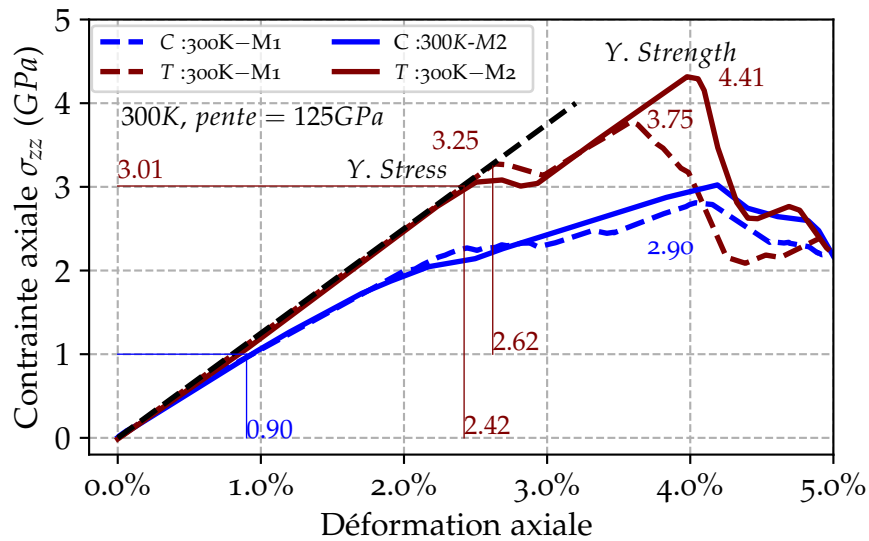


FIGURE B.1 – Comportement mécanique des systèmes γ/γ' - Ni_3Al/Ni à 300K : impact du chemin de thermalisation sur le comportement mécanique en compression (C) et en traction (T).

limite d'élasticité est faible, celle constatée sur la résistance mécanique est non négligeable. Ce résultat est intéressant puisqu'il est en phase avec les résultats expérimentaux obtenus sur les superalliages base nickel, montrant que le traitement thermique subi par le matériau peut avoir un impact sur son comportement mécanique [Sondhi et al., 2004]. Néanmoins, qualitativement, l'évolution des comportements mécaniques reste similaire quelle que soit la méthode de thermalisation adoptée. De plus, quelle que soit la méthode de thermalisation utilisée, l'asymétrie observée sur la limite d'élasticité et sur la résistance mécanique reste présente.

Pour étudier l'impact du temps de stabilisation sur le comportement mécanique, deux méthodes de thermalisation ayant des durées différentes ont été considérées. Pour les deux méthodes, le chemin suivi est le même. La durée de la méthode nommée 1073K – M1 est de 30ps, alors celle de la méthode nommée 1073K – M2 est de 80ps. Les résultats indiqués à la Figure B.2 montrent que la durée de stabilisation, avec la température fixée (température la plus haute de notre étude), n'a pas des impacts significatifs sur le comportement mécanique. Ceci peut être lié au fait que le temps de simulation soit très faible.

IMPACT DE LA GRAINE ALÉATOIRE (*random seed*)

Pour évaluer l'impact de la graine aléatoire sur les résultats obtenus, chaque calcul a été lancé trois fois, avec trois graines aléatoires différentes. Les vérifications ont été effectuées aussi bien avec les nanoparticules isolées, qu'avec les systèmes γ/γ' - Ni_3Al/Ni .

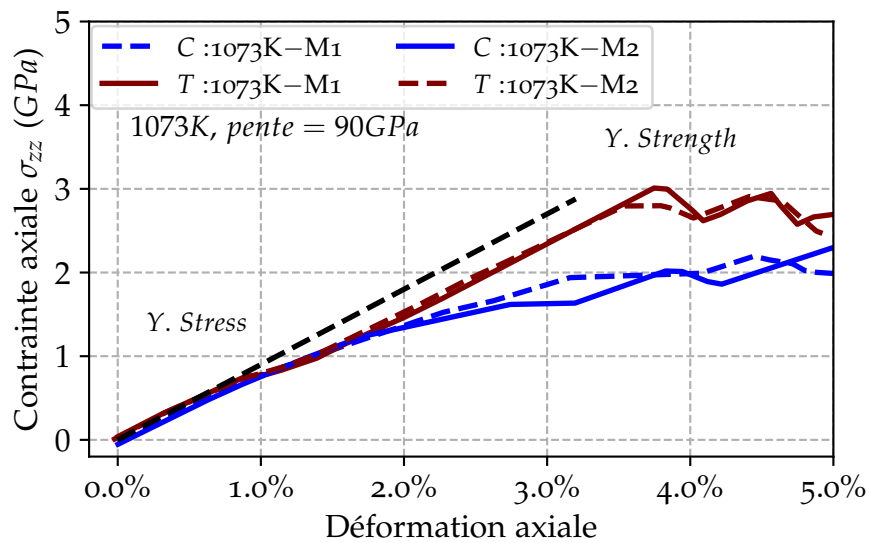


FIGURE B.2 – Comportement mécanique des systèmes γ/γ' - Ni_3Al/Ni à 1073K : impact de la durée de thermalisation sur le comportement mécanique en compression (C) et en traction (T).

La Figure B.3 montre les différents comportements mécaniques obtenus en effectuant des tests de compression sur des nano-cubes isolés de Ni_3Al avec trois différents *random seed*. L'analyse des courbes montre que, quel que soit le *random seed* utilisé, le comportement

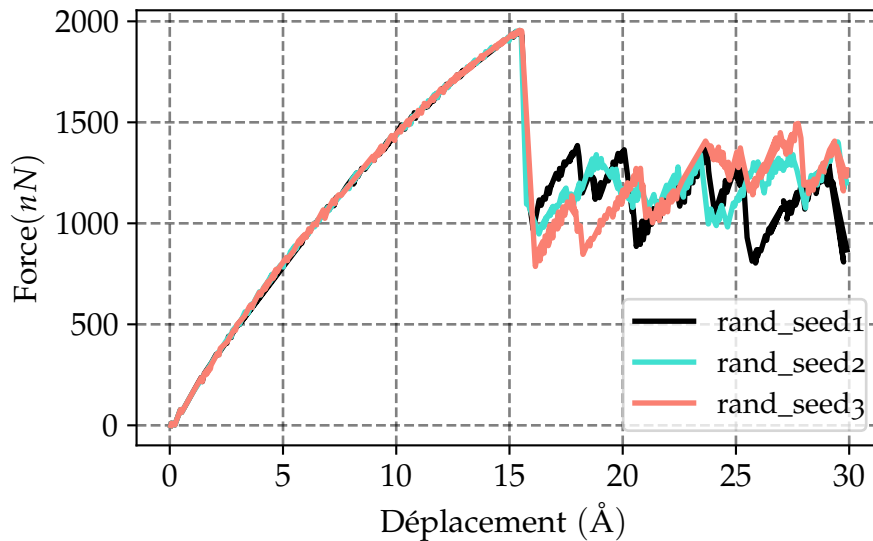


FIGURE B.3 – Impact du *random seed* sur le comportement mécanique des nano-cubes isolés de Ni_3Al .

mécanique obtenu change peu. Ceci veut dire que, la méthode de thermalisation utilisée pour ces tests peut être considérée comme stable.

Concernant le comportement mécanique des systèmes γ/γ' - Ni_3Al/Ni , les variations obtenues sont plus importantes comparées aux variations observées avec les nanoparticules isolées de Ni_3Al . Ceci peut être dû au fait que le système γ/γ' - Ni_3Al/Ni est beaucoup

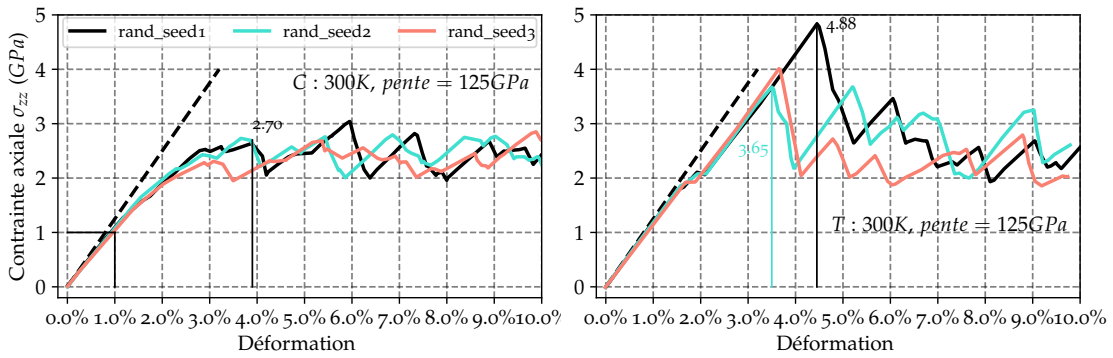


FIGURE B.4 – Comportement mécanique des systèmes γ/γ' - Ni_3Al/Ni : influence du random seed sur le comportement mécanique des microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie occupant des fractions volumiques de l'ordre de 48% à 300K.

plus complexe que celui constitué par les nanoparticules isolées de Ni_3Al . En effet, le système γ/γ' - Ni_3Al/Ni contient différentes phases (matrice, précipité), auxquelles s'ajoute l'interface, susceptibles d'évoluer de manière différente lors de la thermalisation. Deux types de renfort ont été étudiés (cubique et cubique avec des coins et des arêtes arrondis).

La Figure B.4 montre les comportements mécaniques obtenus en compression (C) et en traction (T), avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie à 300K. Il est observé que, quel que soit le sens de sollicitation, le module d'élasticité reste le même indépendamment du *random seed*. Si l'influence de ce dernier sur la limite d'élasticité est faible, son influence n'est pas en revanche négligeable sur la résistance mécanique. Il est constaté aussi que les variations de la résistance mécanique observées en traction, sont plus importantes que celles observées en compression. Sur une plage de déformation comprise entre 0% et 10%, l'écart maximal observé entre les résistances mécaniques est de $0.3GPa$ en compression contre $1.23GPa$ en traction. Ces écarts sont du même ordre de grandeurs que ceux obtenus en étudiant l'impact de certains paramètres tels que la température, la forme et la fraction volumique.

En considérant des plages de déformation différentes, il est constaté que la résistance mécanique change. En compression, pour le "*rand_seed1*", lorsque la plage de déformation est fixée entre 0% et 5%, la résistance mécanique est de $2.70GPa$; tandis que, cette dernière est plutôt égale à $2.70GPa$, si la plage de déformation fixée est comprise entre 0% et 10%. Ceci veut dire que la manière dont cette résistance mécanique est définie n'est pas très pertinente, puisqu'elle varie avec des paramètres dont elle ne devrait pas être fortement dépendante.

Sur des microstructures contenant des renforts de forme cubique, occupant des fractions volumiques de l'ordre de 37%, des résultats similaires observés avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie ont été constatés à température ambiante

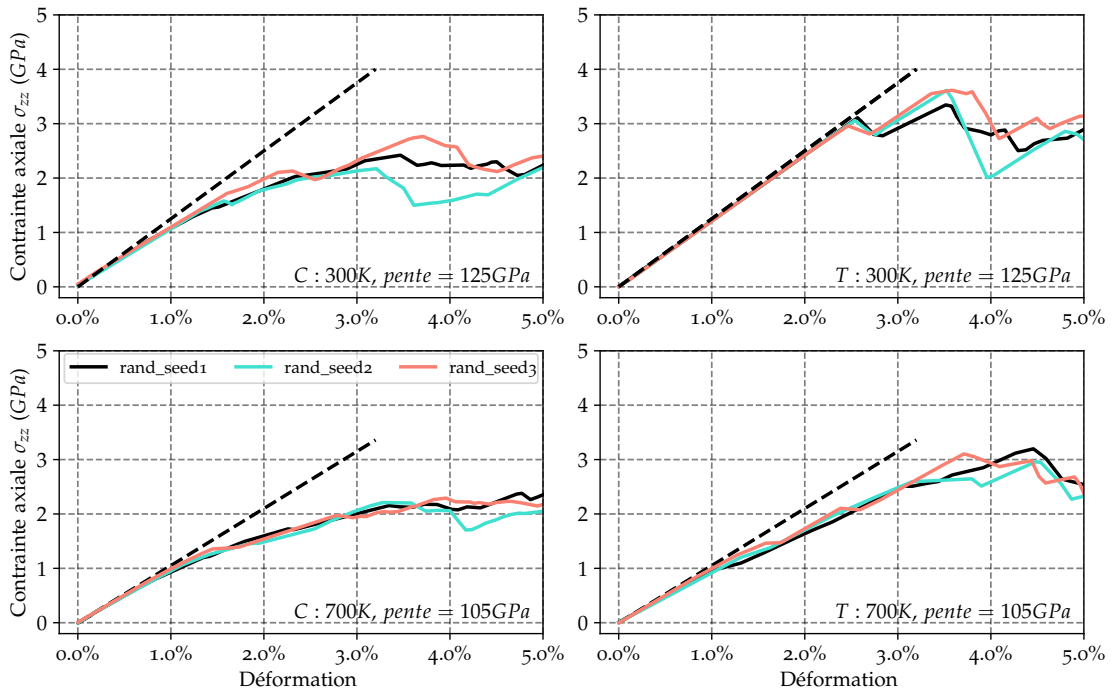


FIGURE B.5 – Comportement mécanique des systèmes γ/γ' - $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$: influence du *random seed* sur le comportement mécanique des microstructures contenant des renforts de forme cubique occupant des fractions volumiques de l'ordre de 38% à 300K et à 700K.

(Figure B.5). En revanche, lorsque la température augmente, une diminution de l'influence du *random seed* est observée. Ceci peut être expliqué par le fait qu'avec l'augmentation de la température, le système est suffisamment agité de sorte qu'il ne puisse pas tomber facilement sur des configurations particulières (Figure B.5).

MÉCANISME DE PLASTICITÉ À HAUTES TEMPÉRATURES

Avec l'augmentation de la température, l'agitation du système fait que des atomes se retrouvent dans des positions, relevant difficilement tant des défauts que du réseau parfait (sans défauts). Ces atomes seront donc considérés comme du bruit, qui augmente avec l'accroissement de la température. Dans les chapitres précédents, seuls les mécanismes de plasticité à 300K et à 700K ont été présentés par simplification, étant donné que des mécanismes similaires sont observés quelle que soit la température. Néanmoins, pour donner plus de détails, certains mécanismes de plasticité obtenus à 500K et à 1073K dans le cas des nanoparticules de Ni_3Al , et dans celui des systèmes $\gamma/\gamma'-Ni_3Al/Ni$ sont présentés ici.

NANOPARTICULES ISOLÉES DE Ni_3Al

La Figure C.1 donne l'évolution du mécanisme de plasticité à 500K et à 1073K d'un nano-cube arrondi avec un coefficient d'arrondissement de 0.35.

À 500K, comme il a été observé à température ambiante (réf. section 3 du chapitre 3), le mécanisme de plasticité débute avec de la nucléation de dislocations partielles de Shockley à partir des coins du nano-cube arrondi. Elles se dirigent ensuite vers les faces opposées tout en laissant derrière elles des défauts d'empilement complexes (CFSs). Lorsque le chargement augmente, d'autres dislocations partielles de Shockley sont générées. Ces dernières glissent dans les plans adjacents aux CFSs préexistants. C'est la raison pour laquelle, au début de la plasticité, les quantités de CSF formées sont plus importantes que celles relatives aux autres types de défauts. Avec l'augmentation de la déformation, ces CFSs peuvent évoluer pour former des pseudo-macles (PTs). Si le chargement augmente, d'autres dislocations glissant dans les mêmes plans où résident les CFSs peuvent être nucléées. Ces dislocations vont transformer les CFSs en parois d'antiphase (APB). Au fur et à mesure que le chargement augmente, on assistera à une augmentation des quantités de

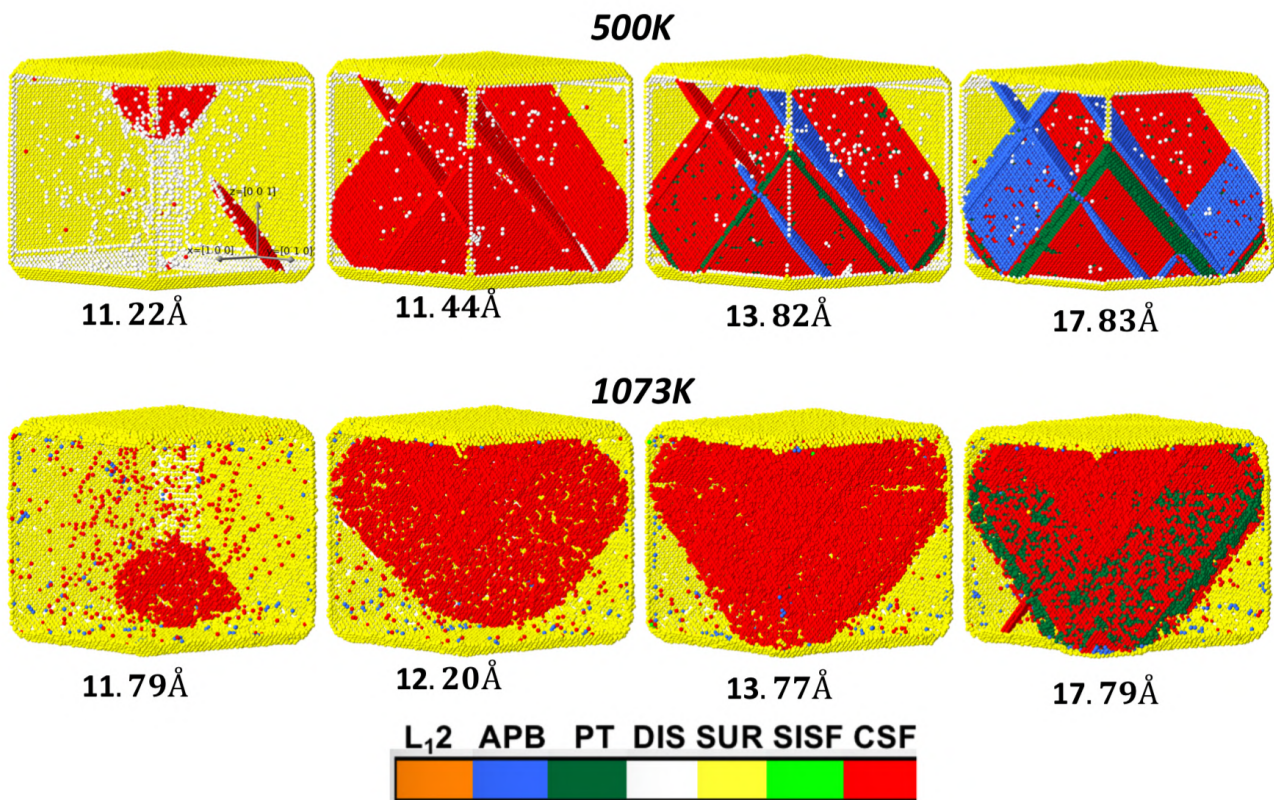


FIGURE C.1 – Comportement mécanique des nanoparticules isolées de Ni_3Al à 500K et 1073K : évolution du mécanisme de plasticité d'un nano-cube arrondi de 15nm de taille, avec un coefficient d'arrondissement de 0.35.

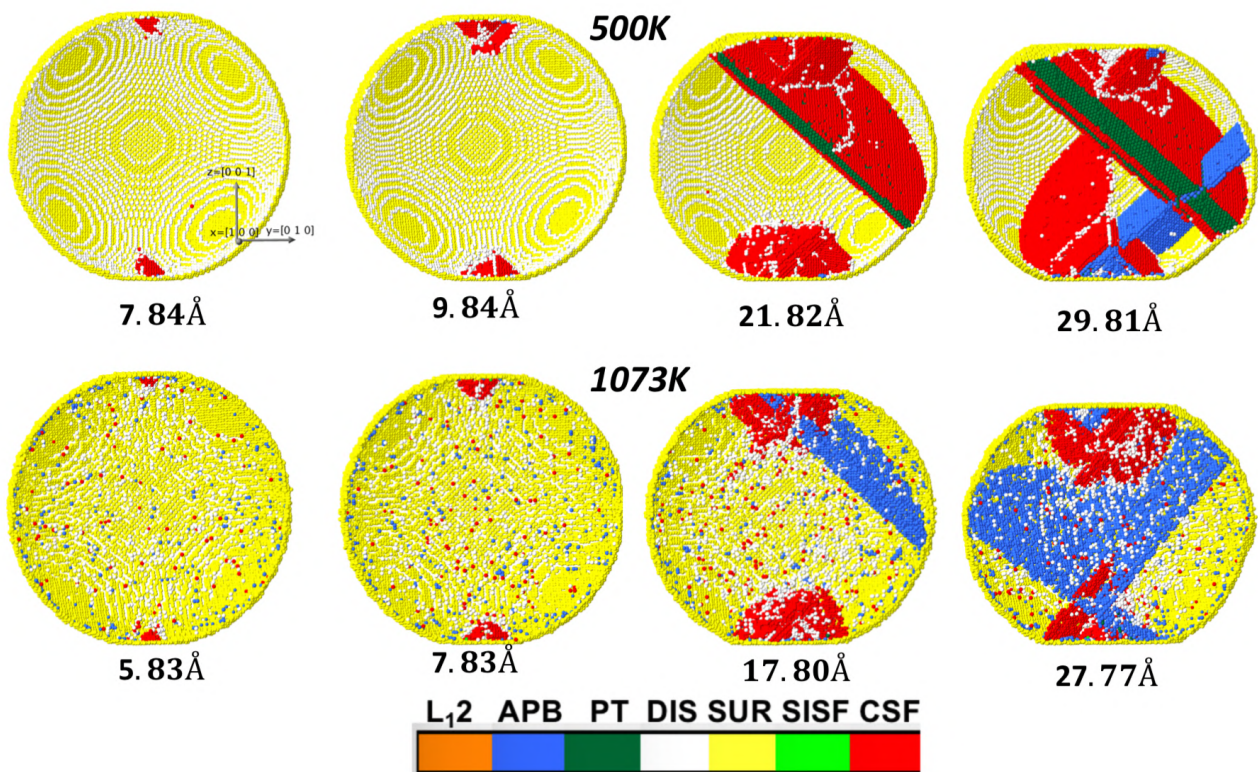


FIGURE C.2 – Comportement mécanique des nanoparticules isolées de Ni_3Al à 500K et 1073K : évolution du mécanisme de plasticité d'une nano-sphère de 18.80nm de taille.

PT et d'*APB*, tandis que la quantité de *CSF* formées diminue.

À une température de 1073K, des mécanismes similaires à ceux obtenus à 500K sont aussi observés. Cependant les types et quantités de défauts varient. Il peut être constaté avec la Figure C.1 que la quantité d'*APB* qui se forment à 1073K est faible comparée à la quantité d'*APB* observées à 500K. Le mécanisme de plasticité à 1073K est dominé par la formation de *CSF* et de *PT*.

Concernant les nanosphères de Ni_3Al , un mécanisme similaire à celui observé à 700K (réf. section 3 du chapitre 3) est obtenu à 500K et à 1073K (Figure C.2). Contrairement au mécanisme observé à température ambiante, où la formation de deux pyramides est observée au début de la plasticité, avec l'augmentation de la température, une seule pyramide se forme. Cette dernière se dissocie lorsque le chargement augmente et les dislocations issues de cette destruction vont glisser vers les faces latérales de la nano-sphère en laissant derrière elles des *CSFs*. Quand la déformation augmente, selon les mêmes mécanismes observés dans les nano-cubes arrondis, il se forme des *PTs* et des *APBs* avec le mécanisme de plasticité constaté à 500K, tandis qu'avec celui obtenu à 1073K, il ne se forme pratiquement que des *APBs*.

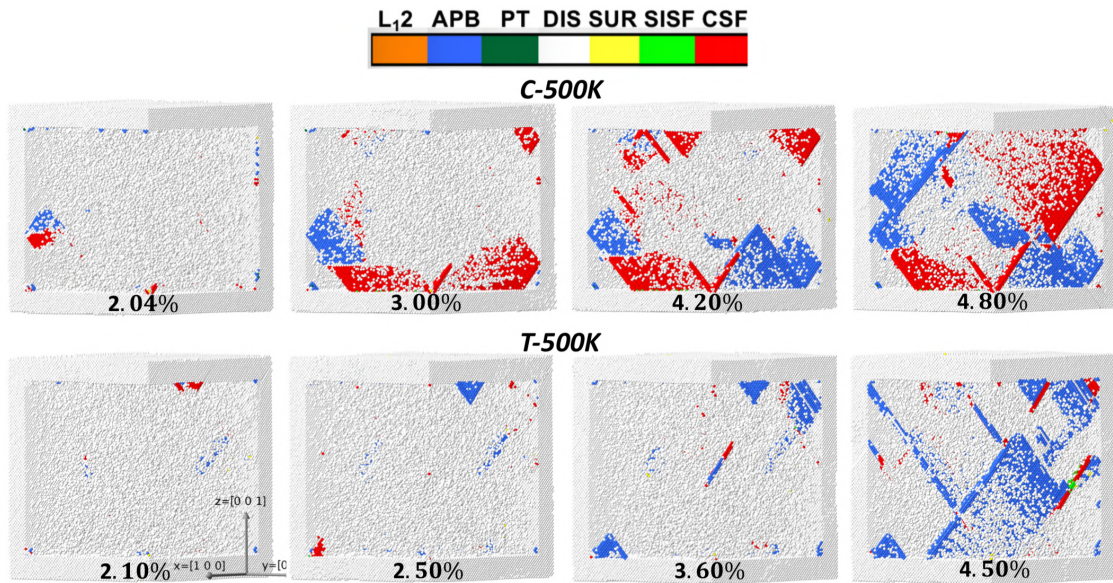


FIGURE C.3 – Comportement mécanique dans les systèmes γ/γ' - Ni_3Al/Ni à 500K : évolution du mécanisme de plasticité à l'intérieur d'un précipité de forme cubique occupant une fraction volumique de l'ordre de 49%.

SYSTÈME γ/γ' - Ni_3Al/Ni

L'évolution du mécanisme de plasticité avec une microstructure contenant un renfort de forme cubique à 500K, en traction et en compression est donnée par la Figure C.3. Indépendamment du sens de sollicitation, des mécanismes similaires à ceux observés à température ambiante sont constatés.

Les deux types de défauts qui se forment majoritairement quel que soit le sens de sollicitation sont les CSFs et les APBs. De plus, comme la tendance observée à température ambiante, il se forme plus de CSF et moins d'APB en compression qu'en traction. Ceci est dû au fait qu'il s'opère plus de glissements individuels de dislocations en compression qu'en traction où le glissement par paire domine.

Lorsque la température augmente encore à 1073K (Figure C.3), le glissement croisé d'un plan $\{111\}$ vers un autre plan $\{111\}$, qui est un mécanisme observé à 300K et à 500K, se produit aussi, indépendamment du sens de sollicitation. Même si les CSFs formées restent plus nombreuses en compression qu'en traction, la quantité d'APB formées en compression devient proche de celle formées en traction. Les quantités de défauts formés dans le précipité diminuent de manière globale avec l'augmentation de température du fait de la diminution de l'activité des dislocations à l'intérieur du précipité.

Quelles que soient la fraction volumique et la forme du précipité, les quantités de SISF

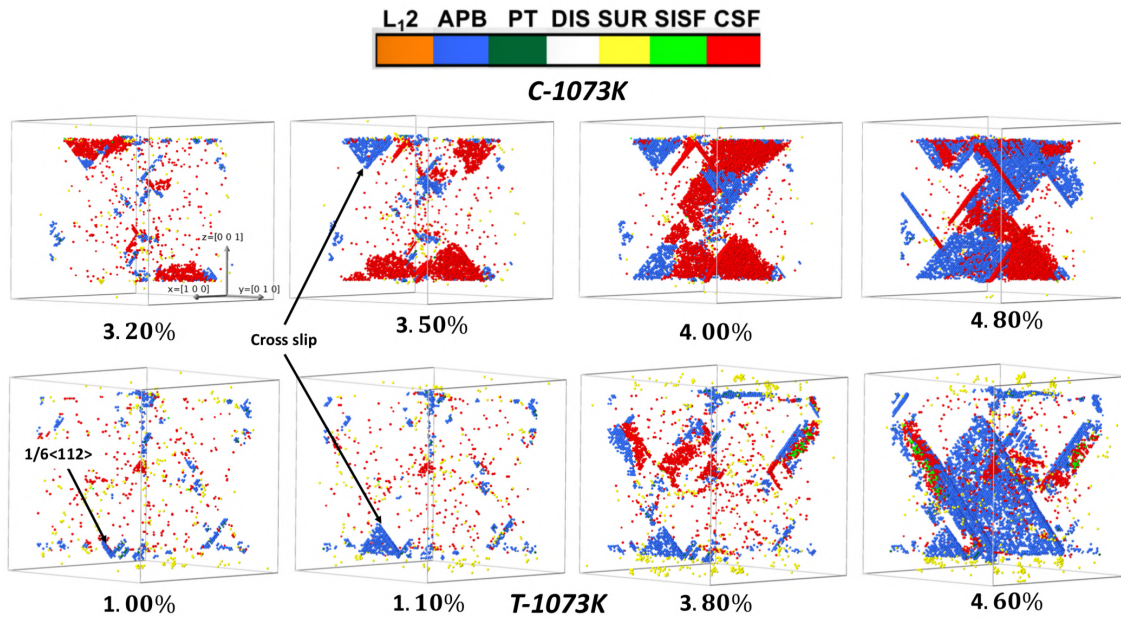


FIGURE C.4 – Comportement mécanique dans les systèmes γ/γ' - $\text{Ni}_3\text{Al}/\text{Ni}$ à 1073K : évolution du mécanisme de plasticité à l'intérieur d'un précipité de forme cubique occupant une fraction volumique de l'ordre de 49%.

et de PT formées en traction et en compression restent très faibles devant les quantités de CSF et d' APB .

DISCUSSION SUR LE SIGNE DU PARAMÈTRE DE MISFIT PAR RAPPORT AUX MOUVEMENTS DES DISLOCATIONS

Pour un superalliage ayant un paramètre de misfit positif :

- La matrice qui a un paramètre de maille plus petit sera en traction, alors que le précipité qui a un paramètre de maille plus grand sera en compression ;
- Lors d'une sollicitation en traction, des études menées sur des superalliages [[Mugh-rabi, 2014](#)] soutiennent que la déformation est localisée dans les couloirs parallèles à l'axe de sollicitation (Figure D.1a) ;
- Si le matériau est sollicité en compression, la déformation sera plutôt localisée dans les couloirs perpendiculaires à l'axe de sollicitation (Figure D.1c).

Avec un superalliage ayant un paramètre de misfit négatif :

- La matrice qui a un paramètre de maille plus grand sera en compression, alors que le précipité qui a un paramètre de maille plus petit sera en traction ;
- La déformation est observée dans les canaux perpendiculaires à l'axe de sollicitation lors d'une sollicitation en traction (Figure D.1b) ;
- Et pendant une sollicitation en compression, la concentration de dislocations est localisée dans les couloirs parallèles à l'axe de de sollicitation (Figure D.1d).

Dans le cadre de notre étude, les paramètres de maille des phases γ' - Ni_3Al et γ - Ni ont respectivement pour valeur 3.567 Å et 3.520 Å. Ce qui révèle l'existence d'un paramètre de misfit positif d'une valeur approximative de 1.33%. Cependant, l'observation du mouvement des dislocations lors des sollicitations en compression et en traction ont montré des tendances inverses à celles présentées ci-dessus :

- En traction, les dislocations résidant dans les couloirs perpendiculaires à l'axe de sollicitation pilotent le début de la plasticité ;

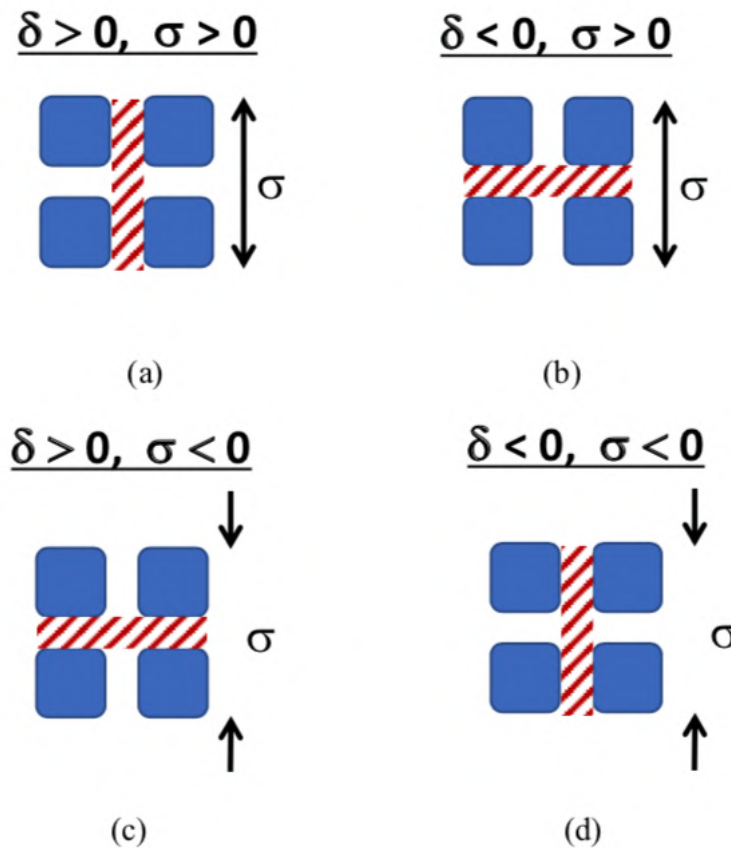


FIGURE D.1 – Zones de concentration de dislocations observées dans les superalliages en traction (a-avec un paramètre de misfit positif et b-avec un paramètre de misfit négatif) et en compression (c-avec un paramètre de misfit positif et d-avec un paramètre de misfit négatif).

- En compression celles qui sont localisées dans les canaux parallèles à l'axe de sollicitation gouvernent les premiers évènements plastiques.

Ce comportement pourrait être causé par différents facteurs :

- Si on considère la manière dont les microstructures sont générées en dynamique moléculaire, le fait que les paramètres de maille utilisés pour générer les microstructures soient les mêmes que ceux obtenus avec le potentiel utilisé entraîne qu'après l'étape de minimisation, le précipité et la matrice ne seront pas respectivement en compression et en traction telle qu'elle est observée dans les superalliages ayant des paramètres de misfit positif. En effet, après l'étape de minimisation, les volumes des deux sous-systèmes (γ' -Ni₃Al et γ -Ni) vont rester similaires à leurs volumes avant minimisation. Ce qui peut expliquer la raison pour laquelle les couloirs dans lesquels les déformations sont observés en traction et en compression soient similaires à ceux d'une microstructure avec un paramètre de misfit négatif.

- Le fait que les dislocations de matrice ne sont pas pris en compte peut aussi expliquer ce comportement. En effet, pour faire une bonne évaluation des concentrations de dislocations dans les couloirs, il est nécessaire de tenir compte de ces dislocations de matrice. Car elles sont toujours présentes dans la matrice, si on considère la microstructure des superalliages.

Nous avons essayé de faire quelques investigations, afin de voir l'éventuel impact de ces deux facteurs cités ci-dessus sur le mécanisme de plasticité selon le sens de sollicitation. Pour obtenir une interface représentative de celle d'une microstructure avec un paramètre de misfit positif, la moyenne des paramètres de maille obtenue avec le potentiel de [Du et al., 2012] a été fixée pour les phases γ' -Ni₃Al et γ -Ni lors de la génération de la microstructure. De ce fait, pendant l'étape de minimisation, le précipité qui a un paramètre de maille plus petit que celui donné par le potentiel tentera de se détendre, tandis que la matrice qui a un paramètre de maille plus grand que celui obtenu avec le potentiel essaiera de se contracter. Le précipité qui aura tendance à se détendre va être bloqué aux interfaces par la matrice qui, elle-même aura tendance à se contracter. Autrement dit, le précipité sera en compression alors que la matrice sera en traction, comme observé dans les systèmes ayant des paramètres de misfit positifs. Comme les paramètres de maille des phases γ' -Ni₃Al et γ -Ni sont les mêmes, l'interface obtenue après l'étape de minimisation est cohérente. Nous avons aussi introduit quelques dislocations dans la matrice de la microstructure cohérente au niveau des six faces. La microstructure obtenue après l'étape de la thermalisation à 300K est donnée par la Figure D.2a. Des tests de traction et de compression ont été ensuite effectués dans cette microstructure à 300K. Les Figures D.2b et D.2c donnent l'évolution des mécanismes de plasticité en compression et en traction au début de la plasticité. En conformité avec les modes de déformations attendus dans une microstructure présentant un paramètre de misfit positif :

- En compression les dislocations qui sont actives sont celles résidant dans les couloirs perpendiculaires à l'axe de sollicitation ;
- En traction celles localisées dans les canaux parallèles à l'axe de sollicitation sont plutôt actives au début de la plasticité.

Ce qui renforce l'hypothèse selon laquelle, l'état de contrainte au niveau de l'interface qui dépend en partie des paramètres de maille fixés lors de la génération des microstructures, de même que la prise en compte des dislocations de matrice jouent des rôles importants dans les modes de déformation, surtout au début de la plasticité.

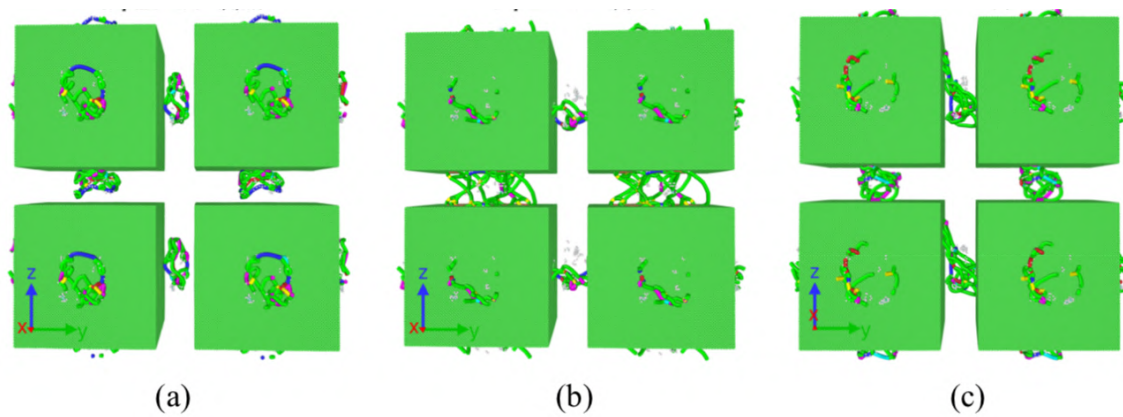


FIGURE D.2 – Système cohérent avec un paramètre de misfit positif : dislocations matricielles mises en mouvement au début de la plasticité en compression (b) et en traction (c). La configuration (a) correspond à celle obtenue après l'étape de thermalisation à 300K (l'axe de sollicitation est suivant la direction z (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).

Mis à part ces deux facteurs, la représentativité du système en termes de taille, de chimie, de temps de simulations ou encore de conditions aux limites pourrait être aussi un facteur explicatif.

Dans le cadre de notre étude par exemple, nous avons considéré une seule cellule et des conditions aux limites périodiques ont été fixées dans les trois directions. Ceci signifie que : lors de la sollicitation axiale, chaque cellule peut subir une déformation supplémentaire causée la déformation de la cellule voisine, en plus de sa déformation du à la sollicitation. Autrement dit l'effet poisson ne sera pas bien pris en compte.

Toutefois, des investigations supplémentaires semblent nécessaires pour bien comprendre l'origine des comportements mécaniques observés selon le sens de la sollicitation et selon le signe du misfit afin de pouvoir apporter des solutions.

LISTE DES FIGURES

1.1	(a)-Variation du module d'élasticité des nanofils de ZnO en fonction de leur diamètre comparé au module d'élasticité du matériau massif correspondant [Chen et al., 2006], (b)-Variation de la limite d'élasticité des nanofils de Pd en fonction de leur diamètre [Seo et al., 2013].	7
1.2	Compression sous microscope électronique d'un nano-pillier de silicium (a)-avant déformation, (b)-nano-pillier déformé par compression, (c)-mise en évidence des plans de glissement (ici plans $\{111\}$) dans lesquels les cisaillements ont été observés [Texier et al., 2019].	7
1.3	Exemple de microstructure d'un superalliage base nickel composé d'une matrice γ dans laquelle se trouve des précipités γ' (secondaires et tertiaires) [Wang et al., 2012].	9
1.4	Modèle expérimental pour la compression des nanoparticules [Deneen et al., 2006].	11
1.5	(a)-Modèle de nucléation de dislocations proposé, (b)-courbe expérimentale chargement-déplacement [Gerberich et al., 2003].	12
1.6	(a)-Modèle de compression avec des plaques atomiques, (b)-distribution de la contrainte le long de l'axe de compression [Gerberich et al., 2003].	12
1.7	Compression de nano-sphères de silicium; en haut : compression élastique (a_1 -avant chargement, b_1 -apparition des contrastes lors du chargement élastique, c_1 -disparition des contrastes après décharge); en bas : compression plastique (a -apparition des contrastes lors du chargement plastique, b -conservation des contrastes après décharge, c -diminution des contrastes malgré l'augmentation du chargement indiquant la rupture de la nano-sphère), [Deneen et al., 2006].	14
1.8	Variation de la contrainte en fonction du diamètre de la nanoparticule d'après [Nowak et al., 2010] et [Wagner et al., 2015].	15
1.9	Compression de nanoparticule de silicium : (a)-avant chargement, (b)-début de chargement avec apparition de bandes de contrastes, (c)-formation d'un embryon indiqué par la flèche jaune, (d)-bandes de contrastes dans les plans $\{111\}$ [Wagner et al., 2015].	16
1.10	Test de compression effectué sur une nanoparticule de cuivre : modèle de chargement avec des plaques de compression virtuelles (gauche), courbe chargement-déplacement avec une vitesse de chargement de $10m/s$ à une température de $10K$ (droite), [Bian and Wang, 2013].	17
1.11	Mécanisme de plasticité : (A)-déformation plastique par glissement de dislocations, (B)-déformation plastique par maclage [Bian and Wang, 2013].	18

1.12	(a)-nanoparticule d'or en forme de polyèdre de Wulff, (b)-variation de la limite d'élasticité en fonction de la taille de la nanoparticule [Feruz and Mordehai, 2016].	19
1.13	(a)-structure de la surface externe d'une nano-sphère d'aluminium, (b-c)-localisation de la contrainte au cours du chargement en fonction de la longueur des marches λ , (A-B)-courbes de chargements, [Salah et al., 2017]. . .	20
1.14	Modèle de compression et arrondissement de cubes parfaits de Ni_3Al (gauche), courbes de chargement (droite) [Amodeo and Lizoul, 2017].	21
1.15	(a-b)-cube parfait et concentration de contrainte au niveau des coins, (c-b)-cube arrondi et concentration de contrainte au niveau du centre [Amodeo and Lizoul, 2017].	21
1.16	(a)-formes utilisées pour la compression, (b)-courbe de chargement contrainte-déformation, (c)-variation de limite d'élasticité en fonction de la taille [Kilymis et al., 2018].	22
1.17	Compression de nano-sphères de cuivre après introduction de joints de macles : (a)-modèle de compression avec les plaques virtuelles, (b)-représentation des joints de macles avec la direction de compression [Bian et al., 2014].	23
1.18	Variation de la limite d'élasticité (gauche) et de l'énergie de déformation (droite) en fonction de l'espacement entre les joints de macles [Bian et al., 2014].	24
1.19	Compression de nanoparticules architecturées : (a)-interface cohérente, (b)-interface amorphe, (c)-variation de l'énergie potentielle à partir du centre de la nanoparticule jusqu'à la surface externe, (d)-courbe de chargement, (e)-variation de la limite d'élasticité en fonction de l'épaisseur de la coquille [Kilymis et al., 2019].	25
1.20	En haut : (a-b)-Déclenchement et évolution du mécanisme de plasticité à partir du cœur, (c)-Déclenchement et évolution à partir de la coquille. En bas : distribution de la contrainte en fonction du ratio cœur/coque [Kilymis et al., 2019].	26
1.21	(a) - Structure cristallographique de type cubique face centrée (CFC), typique d'un matériau comme Ni , Al , Cu , etc. (b) - Structure cristallographique de type $L1_2$, typique du précipité Ni_3Al (atomes de Ni en saumon et d' Al en bleu).	27
1.22	Exemple typique d'une microstructure polycristalline d'un superalliage base nickel [Jackson and Reed, 1997].	29
1.23	(a) - Structure dendritique observée dans une coupe transversale après solidification monocristalline du superalliage $AM3$, (b) - Structure obtenue après les étapes de traitement thermiques d'homogénéisation et de revenu du superalliage monocristallin $AM3$ [Caron, 2016].	30
1.24	Exemple de types d'interfaces pouvant se créer entre les phases γ' (en bleue) et γ (en orange) : (a)-interface semi-cohérente avec la formation d'une dislocation de type coin pour accommoder les contraintes dues au désaccord paramétrique, (b)-interface cohérente avec une distorsion de la matrice due aux contraintes issues du désaccord paramétrique.	32

1.25	Réseau de dislocations interfaciales observées par MET à 1100°C avec une contrainte de 120MPa : (a)-pendant la déformation en fluage primaire dans laquelle on observe un arrangement irrégulier des dislocations qui sont de type $1/2 < 110 >$ et (b)-pendant la phase de transition d'une déformation en fluage primaire vers une déformation en fluage secondaire [Link et al., 2005]).	33
1.26	Influence de la température sur l'évolution des dislocations interfaciales observée avec des calculs de simulations atomistiques [Li et al., 2018] (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 < 110 >$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 < 112 >$, violette : Stair-rod de type $1/6 < 110 >$, jaune : Hirth de type $1/3 < 100 >$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 < 111 >$, rouge : autres types de dislocations).	33
1.27	Variation de la contrainte de misfit le long de l'interface entre matrice (a) et précipité (b). Les résultats sont obtenus en effectuant des calculs de simulation par éléments finis en 2D [Pollock and Argon, 1994]).	34
1.28	Influence de la température sur l'évolution de la microstructure du superalliage monocristallin NASAIR100 : (a)- variation des paramètres de maille des phases γ' et γ en fonction de la température, (b)- variation du paramètre de désaccord au niveau de l'interface γ'/γ [Nathal et al., 1985]).	35
1.29	Influence de la microstructure sur le comportement mécanique : variation de la limite d'élasticité et de l'allongement à la rupture respectivement en fonction de la taille des précipités et de la composition de la microstructure à température ambiante [Harte et al., 2020]).	37
1.30	Influence de la taille des précipités sur la limite d'élasticité : à température ambiante (a) et à une température de 500°C (b) [Grant et al., 2012].	37
1.31	Influence de la fraction volumique sur le comportement mécanique : variation de la durée de vie en fonction de la fraction volumique des précipités γ' [Murakumo et al., 2004]).	38
1.32	Comportement mécanique des superalliages base nickel : variation du module de Young (a) [Ichitsubo et al., 2003] ^a , [Kuhn and Sockel, 1988] ^b , [Siebörger et al., 2001] ^c , [Dye et al., 2009] ^d et de la limite d'élasticité (b) [Reed, 2006] en fonction de la température.	38
1.33	Franchissement d'un précipité par le contournement d'Orowan [Dubost and Sainfort, 1991].	40
1.34	Comportement mécanique dans les superalliages base nickel : (a)-boucle d'Orowan encerclant les précipités γ' , (b)-présence de dislocation fortement couplées [Lv et al., 2015].	41
1.35	Variation de la contrainte de cisaillement résolue (CRSS, Critical Resolved Shear Stress en anglais) en fonction du diamètre des précipités à fraction volumique constante : (1) et (2)-franchissement par cisaillement de précipités avec des dislocations faiblement et fortement couplées respectivement, (3)-franchissement par le mécanisme de contournement d'Orowan lorsque la taille devient supérieur ou égale à D_c d'après le modèle de [Hüther and Reppich, 1978].	42
1.36	Franchissement par cisaillement : (a)-dislocations faiblement couplées (Weak), (b)-dislocations fortement couplées [Jackson and Reed, 1997].	43

1.37	Asymétrie en traction/compression : variation de la résistance mécanique en traction et en compression selon l'orientation cristallographique [Shah and Duhl, 1984].	44
1.38	Asymétrie en traction/compression dans la direction [001] : représentation des modes de glissement favorisant le rapprochement ou l'éloignement des dislocations respectivement en traction et en compression [Shah and Duhl, 1984].	45
1.39	Asymétrie en traction/compression : (a)-variation du comportement mécanique selon le sens de sollicitation entre les états vieilli et non vieilli [Sondhi et al., 2004]; (b, c et d)-impact de la microstructure du matériau sur l'asymétrie en traction/compression ([Tsuno et al., 2008]).	46
2.1	Définition des systèmes étudiés dans le cadre de notre étude : (a) - système isolé (les dimensions de la structure (NP) sont plus petites que celles de la boîte); (b) - système non isolé (les dimensions de la structure et celles de la boîte sont similaires).	68
2.2	Modélisation de la sollicitation mécanique d'une nanoparticule en DM : (A) modèle avec des plaques en structure atomique [Gerberich et al., 2003], (B) modèle avec utilisation d'un champ virtuel [Bian and Wang, 2013].	69
2.3	(a)-Modèles de champ de force : l'IFF (<i>Initial Force Field</i>) est le modèle de champ de force largement utilisé dans la bibliographie [Feruz and Mordehai, 2016, Salah et al., 2017, Amodeo and Lizoul, 2017, Kilymis et al., 2018]. Le MFF (<i>Morse Force Field</i>) est le modèle de champ de force issu de l'énergie d'interaction du champ de Morse; il contient une partie attractive et une partie répulsive. Le RMF (<i>Répulsive Morse Force Field</i>) représente la partie répulsive du MFF. L'insert indique les parties attractives et répulsives du MFF. (b)-Représentation du contact entre les plaques de compression et les premiers couches atomiques de la nano-sphère : r_1 et r_2 représentent les positions des plaques de compression avant et après dépassement de la première couche atomique (en bleue) respectivement, r_i représente la position d'un atome pris dans la nanoparticule.	76
2.4	Influence du modèle de champ de force sur le comportement mécanique : courbes force-déplacement obtenues en effectuant des tests de compression avec les trois modèles de champ de force (IFF, MFF et RMF) sur une NP de 20nm de taille selon les directions a -[010], b -[111], c -[123] et d -[211].	78
2.5	Influence du modèle de champ de force sur le comportement mécanique : l'évolution du mécanisme de plasticité observée en effectuant des tests de compression sur une NP d'Al de 20nm de taille, à 10K et 300K, suivant la direction [010] en utilisant les trois modèles de champ de force (IFF, MFF et RMF) (verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, marron : sessiles de type $1/3 \langle 101 \rangle$).	79

2.6	Impact du modèle de champ de force sur le comportement mécanique : l'évolution du mécanisme de plasticité observée en effectuant des tests de compression sur une NP de Ni de 20nm de taille, à 10K et 300K, suivant la direction [010] en utilisant les trois modèles de champ de force (<i>IFF</i> , <i>MFF</i> et <i>RMF</i>) (verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, marron : sessiles de type $1/3 \langle 101 \rangle$).	80
2.7	Influence du modèle de champ de force sur le comportement mécanique : l'évolution des mécanismes de plasticité obtenues en effectuant des tests de compression avec les trois modèles de champ de force (<i>IFF</i> , <i>MFF</i> et <i>RMF</i>) sur une NP de 20nm de taille, à 10K et 300K, suivant la directions [211] (atomes verts : dislocations, atomes blancs : surface, atomes rouges : défauts d'empilement).	82
2.8	Impact du modèle de champ de force et de la graine aléatoire (pour l' <i>IFF</i>) : comportements mécaniques obtenus en effectuant des tests de compression sur une NP de 20nm de taille suivant les directions [110]-(a) and [120]-(b). (<i>IFF-Mode1</i> and <i>IFF-Mode1</i> correspond aux deux modes de déformation observés en effectuant des tests de compression avec le <i>IFF</i> en utilisant deux graines aléatoires différentes)	84
2.9	Mécanisme de plasticité observé dans la direction [110] : (a), (b) et (c) indiquent un mode de déformation dominé par du glissement de dislocations (<i>M1-110</i>). Ce mode de déformation est observé à 10K et 300K avec les champs <i>IFF</i> et <i>MFF</i> uniquement. (d), (e) et (f) indiquent un mode de déformation dominé par du maclage (<i>M2-110</i>). Ce mode de déformation est observé à 10K seulement, avec le <i>IFF</i> et le <i>RMF</i> . À 300K, il est seulement observé avec le <i>RMF</i> (atomes verts : dislocations, atomes blancs : surface, atomes rouges : défauts d'empilement).	85
2.10	Mécanisme de plasticité observé dans la direction [120] : (a), (b) et (c) indiquent un mode de déformation dominé par du glissement de dislocations (<i>M1-120</i>). Ce mode de déformation est observé à 10K et 300K seulement avec l' <i>IFF</i> et le <i>RMF</i> . (d), (e) et (f) indiquent un mode de déformation dominé par du glissement de dislocations au début de la plasticité et par du maclage, à un niveau de déplacement de 43 Å et 57 Å respectivement avec les modèles <i>IFF</i> et <i>MFF</i> (<i>M2-120</i>). Ce mode de déformation est observé à 10K et 300K seulement avec le <i>IFF</i> et le <i>MFF</i> (atomes verts : dislocations, atomes blancs : surface, atomes rouges : défauts d'empilement).	86
2.11	Influence de la distance de contact sur l'effet de taille et/ou de forme : (a)-effet de géométrie de surface observé en fixant une distance de contact égale à 0.1 Å, comme observé dans [Salah et al., 2017], (b)-absence d'effet de géométrie de surface quand la distance de contact augmente, passant de 0.1 Å à 1.43 Å.	88

2.12	Impact du modèle de champ de force sur l'effet de taille et/ou de forme : (a)-effet de géométrie de surface observé en fixant une distance de contact égale à 0.1 \AA , comme observé dans [Salah et al., 2017], (b)-absence d'effet de géométrie de surface en effectuant des tests de compression avec le <i>RMF</i> , (c)-limites d'élasticité similaires pour les NPs de taille 20.01 nm et 20.17 nm lors des tests de compression avec le <i>MFF</i> . La partie attractive du <i>MFF</i> influe de manière significative sur le comportement mécanique des NPs de taille 4.01 nm et 8 nm , les comportements mécaniques obtenus avec ces deux NPs sont montrés sur la Figure (d).	88
2.13	Impact du modèle de champ de force sur l'effet de taille et/ou de forme : (a) et (b)-variations des surfaces de contact pour l' <i>IFF</i> avec des distances de contact de 0.1 \AA et 1.43 \AA respectivement, (c) and (d)-variations des surfaces de contact pour les modèles <i>RMF</i> et <i>MFF</i> respectivement avec une distance de coupure de 6.0 \AA	93
2.14	Impact du modèle de champ de force sur le comportement mécanique : (a) et (b)-l'évolution des forces de chargement pour les modèles <i>IFF</i> et <i>RMF</i> respectivement, (c)-variations des forces de chargement avec le modèle <i>MFF</i> pour les NPs de tailles 20.17 nm et 20.01 nm (la partie attractive du <i>MFF</i> influe de manière significative sur le comportement mécanique avec la diminution de la taille des NPs, les comportements mécaniques observés avec les NPs de tailles 8 nm et 4 nm sont montrés dans la Figure (d) pour une meilleure visibilité).	95
2.15	Influence de la définition de la surface de contact sur le comportement mécanique obtenu avec l' <i>IFF</i> : (a) et (b)-l'évolution des surfaces de contact avec une distance de contact de 0.1 en utilisant les méthodes de Vergeles et Delaunay respectivement, (c) and (d)-courbes contrainte-déformation obtenues avec ces deux méthodes (Vergeles et Delaunay respectivement).	96
2.16	Impact de la définition de la surface de contact sur le comportement mécanique obtenu avec le <i>RMF</i> : (a) et (b)-l'évolution des surfaces de contact avec un rayon de coupure de 6.0 en utilisant les méthodes de Vergeles et Delaunay respectivement, (c) et (d)-courbes contrainte-déformation obtenues avec ces deux méthodes (Vergeles et Delaunay respectivement).	97
2.17	Impact de la définition de la surface de contact sur le comportement mécanique obtenu avec le <i>MMF</i> : (a) et (b)-l'évolution des surfaces de contact avec un rayon de coupure de 6.0 en utilisant les méthodes de Vergeles et Delaunay respectivement, (c) et (d)-courbes contrainte-déformation obtenues avec ces deux méthodes (Vergeles et Delaunay respectivement). Pour une meilleure visibilité, les NPs de 8 nm et de 4 nm de taille ne sont pas montrées ici.	97

3.1	Les petits, moyens et grands cercles représentent respectivement les couches du bas, du milieu et du haut. Les cercles foncés représentent des atomes de nickel et les cercles clairs représentent des atomes d'aluminium. (a)-Empilement de trois plans $\{111\}$ avant cisaillement (sans défaut), (b)-cisaillement dans la direction $1/2[\bar{1}01]$ et formation d'un paroi d'antiphase (APB), (c)-cisaillement dans la direction $1/3[\bar{2}11]$ et formation d'un défaut d'empilement intrinsèque (SISF), (d)-cisaillement dans la direction $1/6[\bar{1}12]$ et formation d'un défaut d'empilement complexe (CSF) [Pope and Ezz, 1984].	105
3.2	(a)-glissement de deux super-partielles séparées par un paroi d'antiphase (APB) dans les plans $\{111\}$. (b)-glissement dévié d'une super-partielle et formation d'APB dans les plans $\{100\}$ [Hull and Bacon, 2001].	107
3.3	Modes de dissociation d'une super-dislocation $\langle 110 \rangle$: (a)- dissociation en quatre dislocations super-partielles de Shockley séparées par deux (CSF) et une (APB), (b)-dissociation en six super-partielles de Shockley $1/6 \langle 110 \rangle \{111\}$ séparées par deux CSFs, deux APBs et un (SISF), (c)-dissociation en deux dislocations de type $1/3 \langle 211 \rangle$ séparées par un SISF, (d)-dissociation en quatre dislocations de type $1/3 \langle 211 \rangle$ séparées par un SISF et un SESF [Reed, 2008].	108
3.4	Mode de déformation homogène : nucléation de dislocations au centre de la nanoparticule dans des nano-cubes arrondis de Ni_3Al de taille L à partir d'un certain coefficient d'arrondissement α [Amodeo and Lizoul, 2017].	110
3.5	(a)-méthode d'arrondissement des coins et des arêtes utilisée dans le cadre de cette étude, (b)-conditions aux limites fixées pour la compression des nanoparticules, (c)- Mode de déformation en fonction de la taille et du coefficient d'arrondissement.	111
3.6	Évolution de la force et de la contrainte respectivement en fonction du déplacement et de la déformation d'un nano-cube de $10nm$ de taille en fonction de ses coefficients d'arrondissement.	112
3.7	Évolution de la contrainte en fonction de la déformation pour les nano-cubes de tailles ($5nm$, $15nm$, $17.8nm$, $20nm$) selon leurs coefficients d'arrondissement.	112
3.8	Évolution de la force et de la contrainte respectivement en fonction du déplacement et de la déforce entre $5K$ et $300K$ pour un nano-cube de $10nm$ de taille avec un coefficient d'arrondissement de 0.20 .	114
3.9	Nanoparticule de $10nm$ de taille avec un coefficient d'arrondissement de 0.15 : (a)-structure de cœur des dislocations au niveau des sites de nucléation juste avant les premiers événements plastiques, (b), (c), (d)-évolution de la contrainte de cisaillement juste avant nucléation en fonction de la température.	115
3.10	Variation du comportement et de la surface de contact (calculée en se basant sur la méthode de la triangulation Delaunay utilisée dans [Kilymis et al., 2018]) en fonction de la déformation pour différents coefficients d'arrondissement.	116
3.11	Évolution du comportement mécanique en fonction de l'orientation cristallographique pour différentes tailles et différents coefficient d'arrondissement	118

3.12	Évolution du mécanisme de plasticité pour un nano-cube arrondi de $15nm$ de taille avec un coefficient d'arrondissement de 0.35 sollicitée dans la direction $[001]$	119
3.13	Évolution du mécanisme de plasticité pour un nano-cube arrondi de $15nm$ de taille avec un coefficient d'arrondissement de 0.35 sollicitée dans la direction $[110]$	121
3.14	Variation des quantités et types de défauts en fonction de la déformation selon l'orientation de l'axe de sollicitation.	121
3.15	Variation de la force appliquée (a), du nombre d'atomes (b), de la contrainte en appliquant la méthode de Vergeles (c) et en appliquant la méthode de la triangulation de Delaunay (d).	123
3.16	Variation de la surface de contact par déplacement des atomes de la première couche vers la seconde couche.	124
3.17	Variation de la contrainte appliquée en fonction de la taille en utilisant la méthode de Vergeles et celle de la triangulation de Delaunay pour l'évaluation des surfaces.	125
3.18	Évolution des premiers événements plastiques dans une nano-sphère de $18.8nm$ de taille selon l'orientation $[001]$ à $300K$ (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 < 110 >$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 < 112 >$, jaune : Hirth de type $1/3 < 100 >$, marron : dislocations sessile de type $1/3 < 110 >$).	127
3.19	Évolution du mécanisme de plasticité, pour des taux de compression compris entre 9.60% et 13.94%, dans une nano-sphère de $18.8nm$, selon l'orientation $[001]$, à $5K$	128
3.20	Évolution du comportement mécanique pour une nano-sphère de $18.8nm$, à $5K$ et à $300K$, suivant l'orientation $[001]$	129
3.21	Évolution du mécanisme de plasticité pour des taux de compression compris entre 9.57% et 12.79%, dans une nano-sphère de $18.8nm$, selon l'orientation $[001]$, à $300K$	130
3.22	Variation de la force appliquée sur un nano-cube de $15nm$ en fonction du déplacement, avant et après application du filtre de [Savitzky and Golay, 1964], pour des températures de $300K$, $500K$, $700K$ et $1073K$	132
3.23	Évolution du comportement mécanique et de la surface de contact d'un nano-cube de $15nm$ à $300K$, $500K$, $700K$ et $1073K$ suivant l'orientation $[001]$	132
3.24	Évolution du mécanisme de plasticité d'un nano-cube de $15nm$ à $700K$ comprimé suivant l'orientation $[001]$	133
3.25	Évolution des quantités et types de défauts dans un nano-cube de $15nm$ à $300K$, $500K$, $700K$ et $1073K$ pendant la compression suivant l'orientation $[001]$	134
3.26	Évolution du comportement mécanique (force-déplacement et contrainte déformation), et de la surface de contact d'un nano-cube arrondi de $15nm$ à $300K$, $500K$, $700K$ et $1073K$ suivant l'orientation $[001]$	135
3.27	Évolution du mécanisme de plasticité d'un nano-cube arrondi de $15nm$ à $700K$ comprimé suivant l'orientation $[001]$	136
3.28	Évolution des quantités et types de défauts dans un nano-cube arrondi de $15nm$ à $300K$, $500K$, $700K$ et $1073K$ pendant la compression suivant l'orientation $[001]$	136

3.29	Évolution du comportement mécanique (force-déplacement et contrainte déformation), et de la surface de contact d'une nano-sphère de 18.8nm à 300K, 500K, 700K et 1073K suivant l'orientation [001].	137
3.30	Évolution du mécanisme de plasticité d'une nano-sphère de 18.8nm à 700K comprimé suivant l'orientation [001]. (a, b et c)-(verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 < 112 >$, jaune : Hirth de type $1/3 < 100 >$, marron : dislocations sessiles de type $1/3 < 110 >$).	138
3.31	Évolution des quantités et types de défauts dans une nano-sphère de 18.8nm de taille à 300K, 500K, 700K et 1073K pendant la compression suivant l'orientation [001].	139
3.32	Évolution des quantités totales de défauts à 300K, 500K, 700K et 1073K en fonction de la forme pendant la compression suivant l'orientation [001].	139
4.1	Coupe transversale suivant le plan yz de la cellule initiale obtenue après l'étape de la minimisation. Le système est constitué de deux phases (γ -Ni et γ' -Ni ₃ Al) avec un précipité de forme cubique (atomes de Ni de couleur saumon et d'Al de couleur bleue).	146
4.2	Diagramme d'équilibre du système binaire Ni – Al. Les lignes bleues indiquent les deux températures limites correspondant aux fractions volumiques (plus petite et plus grande) fixées dans le cadre de cette étude.	148
4.3	Structure (Ni ₃ Al/Ni - γ'/γ) obtenue après l'étape de minimisation. (a)-Coupe transversale suivant le plan (yz) pour mettre en évidence les différentes phases, (b)- Suppression de la phase γ -Ni pour montrer les dislocations de misfit au niveau de l'interface, (c)-Coupe transversale suivant le plan (yz) et (d)-suppression de la phase γ -Ni pour montrer la distribution de contrainte respectivement localisée dans les coins tel un système 2D et dans les endroits où se forment les dislocations de misfit dans un système 3D.	149
4.4	Méthode de thermalisation : évolution de la température en fonction du temps pendant les étapes de thermalisation à 300K-M1, 500K, 700K et 1073K-M1 (a) ; à 300K-M2 et à 1073K-M2 (b).	150
4.5	Méthode de thermalisation : évolution de la vitesse de montée en température pendant l'étape de thermalisation à 300K-M2 en fonction du paramètre de relâchement τ en ps.	151
4.6	Impact de la thermalisation aux températures de 300K, 500K, 700K et 1073K sur la structure de dislocations de misfit. (a)-Structure de dislocations de misfit obtenue après l'étape de relaxation avant thermalisation ; (b)-Structure de dislocations de misfit obtenue avec la méthode 300K-M1 ; (c)-Structure de dislocations de misfit obtenue avec la méthode 300K-M2 ; (d)-Structure de dislocations de misfit obtenue à 500K ; (e)-Structure de dislocations de misfit obtenue 700K et (f)-Structure de dislocations de misfit obtenue 1073K (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 < 110 >$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 < 112 >$, violette : Stair-rod de type $1/6 < 110 >$, jaune : Hirth de type $1/3 < 100 >$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 < 111 >$, rouge : autres types de dislocations).	152
4.7	Variation de la fraction volumique en fonction de la température pendant les étapes de thermalisation à 300K, 500K, 700K et 1073K.	153

4.8	Coefficient de dilatation thermique ($\alpha_{300K-1073K}$) estimé en se basant sur la variation du volume du système pendant les étapes de thermalisation à 300K, 500K, 700K et 1073K.	154
4.9	Conditions aux limites : représentation de quatre cellules voisines pour visualiser l'emplacement des précipités par rapport à leurs voisins et indication des directions de chargement. Une partie des atomes appartenant à la matrice est supprimée pour mettre en évidence les deux phases $\gamma-Ni$ et $\gamma'-Ni_3Al$ (atomes de Ni en saumon et d' Al en bleu).	155
4.10	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K en compression et en traction à 300K : évolution de la contrainte σ_{zz} en fonction de la déformation suivant l'axe de sollicitation z	157
4.11	Évolution de la structure de dislocations : (a)-après thermalisation à 300K, (b)-au début de la compression et (c)-au début de la traction.	158
4.12	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K : évolution du mécanisme de plasticité lors de la sollicitation en compression. (a)-2.20% de déformation, (b)-2.50% de déformation, (c)-3.30% de déformation et (d)-4.50% de déformation (bleu : APB , rouge : CSF , blanc : matrice $\gamma - Ni$ et/ou dislocation, vert : PT). Seuls les mécanismes de plasticité se produisant dans la phase γ' sont ici représentés.	159
4.13	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K : évolution du mécanisme de plasticité lors de la sollicitation en traction. (a)-2.90% de déformation, (b)-3.00% de déformation, (c)-4.00% de déformation et (d)-4.50% de déformation (bleu : APB , rouge : CSF , blanc : matrice $\gamma - Ni$ et/ou dislocation, vert : PT). Seuls les mécanismes de plasticité se produisant dans la phase γ' sont ici représentés.	160
4.14	Comportement mécanique en compression et en traction à 300K : évolution des quantités d' APB (paroi d'antiphase), de CSF (défauts d'empilement complexes), de PT (pseudo macles) et de $SISF$ (défauts d'empilement super intrinsèques) en fonction de la déformation en traction (T) et en compression (C) à 300K.	161
4.15	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K, 500K, 700K et 1073K : courbes de contrainte-déformation obtenues en effectuant des tests de compression (en bleu) et de traction (en marron) selon la direction $[001]$	162
4.16	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K, 500K, 700K et 1073K : variation du module d'élasticité en fonction de la température. Les valeurs obtenues avec nos simulations sont comparées avec des valeurs issues de la littérature ([Ichitsubo et al., 2003] ^a , [Kuhn and Sockel, 1988] ^b , [Siebörger et al., 2001] ^c).	163
4.17	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K, 500K, 700K et 1073K : variation de l'asymétrie sur la limite d'élasticité (Y_T/Y_C) et sur la résistance mécanique (R_T/R_C) en fonction de la température. La variation du paramètre de misfit Ni_3Al/Ni -misfit(δ) en fonction de la température est aussi représentée.	164
4.18	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K, 500K, 700K et 1073K : évolution de la densité de dislocations de misfit et des paramètres de mailles des phases $\gamma-Ni$ et $\gamma'-Ni_3Al$ en fonction de la température.	165

4.19	Evolution de la structure de dislocations de misfit à 500K, 700K et 1073K : (a, d, g)-après l'étape de thermalisation, (b, e, h)-au début de la compression et (c, f, i)-au début de la traction (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 < 110 >$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 < 112 >$, violette : Stair-rod de type $1/6 < 110 >$, jaune : Hirth de type $1/3 < 100 >$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 < 111 >$, rouge : autres types de dislocations).	166
4.20	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 700K : évolution des mécanismes de plasticité lors de la sollicitation en compression (bleu : APB, rouge : CSF, blanc : matrice $\gamma - Ni$ et/ou bruit, vert : PT). Seuls les mécanismes de plasticité se produisant dans la phase γ' sont ici représentés.	169
4.21	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 700K : évolution des mécanismes de plasticité lors de la sollicitation en traction (bleu : APB, rouge : CSF, blanc : matrice $\gamma - Ni$ et/ou bruit, vert : PT). Seuls les mécanismes de plasticité se produisant dans la phase γ' sont ici représentés.	171
4.22	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K, 500K, 700K et 1073K : évolution des quantités moyennes de défauts dans le précipité lors des sollicitations en compression et en traction (les barres d'erreur représentent les écarts types sur les moyennes calculées).	171
4.23	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K : distribution de la contrainte de von Mises en surface du précipité Ni_3Al pendant les chargements élastique et plastique en compression et en traction.	172
4.24	Distribution des contraintes de cisaillement (σ_{xy} , σ_{xz} et σ_{yz}) au niveau de l'interface entre les phases $\gamma-Ni$ et $\gamma'-Ni_3Al$ après les étapes thermalisation à 300K (a, b et c) et 1073K (d, e et f). Pour plus de visibilité la phase $\gamma-Ni$ est supprimée. Seul le précipité $\gamma'-Ni_3Al$ et l'interface sont montrés.	174
5.1	Structure de dislocations de misfit obtenue entre les phases $\gamma-Ni$ et $\gamma'-Ni_3Al$ après l'étape de minimisation (a et b) et de thermalisation (c et d) à 300K pour des coefficients d'arrondissement de 0.20 et 0.45 (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 < 110 >$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 < 112 >$, violette : Stair-rod de type $1/6 < 110 >$, jaune : Hirth de type $1/3 < 100 >$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 < 111 >$, rouge : autres types de dislocations).	185
5.2	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K, 500K, 700K et 1073K : impact de l'arrondissement des précipités sur le comportement mécanique en compression et en traction.	187
5.3	Évolution des structures de dislocations de misfit à 300K dans les microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie. (a, b et c)-Microstructure arrondie avec un coefficient d'arrondissement de 0.20, (d, e et f)-microstructure arrondie avec un coefficient d'arrondissement de 0.45. (a et d)-structures de dislocations de misfit après l'étape de la thermalisation, (b et e)-structures de dislocations de misfit au début de la compression et (c et f)-structures de dislocations de misfit au début de la traction.	189

- 5.4 Comportement mécanique du système Ni_3Al/N_i à 300K : évolution des quantités moyennes de défauts dans le précipité en fonction du coefficient d'arrondissement lors des tests de compression et de traction uni-axiales selon la direction [001] (les barres d'erreurs représentent les écarts types calculés sur les moyennes). 189
- 5.5 Évolution des structures de dislocations de misfit avec les microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie après thermalisation à 500K, 700K et 1073K (**bleue** : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, **verte** : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, **violette** : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, **jaune** : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, **cyan** : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, **rouge** : autres types de dislocations) pour les coefficients d'arrondissement de 0.20 (*a, b et c*) et 0.45 (*d, e et f*). 193
- 5.6 Comportement mécanique du système Ni_3Al/N_i à 500K, 700K et 1073K : évolution des quantités moyennes de défauts dans le précipité en fonction du coefficient d'arrondissement lors des sollicitations en compression et en traction selon la direction [001] (les barres d'erreurs représentent les écarts-types calculés sur les moyennes). 194
- 5.7 Impact de la fraction volumique sur le comportement mécanique à 300K : évolution de la structure de dislocations de misfit obtenue après la thermalisation pour des microstructures contenant des renforts cubiques qui occupent des fractions volumiques de l'ordre de 38%-(a), 49%-(b) 56%-(c) et 63%-(d) (**bleue** : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, **verte** : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, **violette** : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, **jaune** : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, **cyan** : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, **rouge** : autres types de dislocations). 195
- 5.8 Influence de la fraction volumique sur le comportement mécanique à 700K : évolution de la structure de dislocations de misfit obtenue après thermalisation pour des microstructures contenant des renforts cubiques qui occupent des fractions volumiques de l'ordre de 38%-(a), 49%-(b) 56%-(c) et 63%-(d) (**bleue** : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, **verte** : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, **violette** : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, **jaune** : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, **cyan** : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, **rouge** : autres types de dislocations). 196
- 5.9 Comportement mécanique à 300K : impact de la variation de la fraction volumique sur le comportement mécanique des microstructures contenant des renforts de forme cubique lors des tests de compression (*bleue*) et de traction (*marron*) uni-axiales selon la direction [001]. 198
- 5.10 Comportement mécanique des systèmes Ni_3Al/N_i à 300K et à 700K : impact de la fraction volumique des renforts de forme cubique sur l'évolution de l'asymétrie en traction/compression observée sur la limite d'élasticité (Y_T/Y_C) et sur la résistance mécanique (R_T/R_C) à 300K et à 700K. 198
- 5.11 Comportement mécanique à 700K : impact de la variation de la fraction volumique sur le comportement mécanique des microstructures contenant des renforts de forme cubique lors des tests de compression (*bleue*) et de traction (*marron*) selon la direction [001]. 199

5.12	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K et à 700K : évolution des quantités moyennes de défauts dans les précipités de forme cubique lors des sollicitations en compression et en traction en fonction de la fraction volumique (les barres d'erreurs représentent les écarts types calculés sur les moyennes).	201
5.13	Impact de la fraction volumique sur le comportement mécanique à 300K : évolution de la structure de dislocations de misfit obtenue après la thermalisation pour des microstructures contenant des renforts cubiques arrondis, occupant des fractions volumiques de l'ordre de 37%-(a), 48%-(b) 55%-(c) et 62%-(d) (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).	204
5.14	Impact de la fraction volumique sur le comportement mécanique à 700K : évolution de la structure de dislocations de misfit obtenue après la thermalisation pour des microstructures contenant des renforts cubiques arrondis, occupant des fractions volumiques de l'ordre de 37%-(a), 48%-(b) 55%-(c) et 62%-(d) (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).	205
5.15	Comportement mécanique à 300K : impact de la variation de la fraction volumique sur le comportement mécanique des microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie lors des tests de compression (bleue) et de traction (marron) selon la direction $[001]$	206
5.16	Comportement mécanique à 700K : impact de la variation de la fraction volumique sur le comportement mécanique des microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie lors des tests de compression (bleue) et de traction (marron) selon la direction $[001]$	207
5.17	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K et à 700K : impact de la fraction volumique des renforts de forme cubique arrondie sur l'évolution de l'asymétrie en traction/compression observée sur la limite d'élasticité (Y_T/Y_C) et sur la résistance mécanique (R_T/R_C) à 300K et à 700K.	208
5.18	Evolution des mécanismes de plasticité à 700K : glissement dévié sur plusieurs plans $\{111\}$ d'une paire de dislocations partielles de Shockley, observé lors de la sollicitation en traction (un mécanisme similaire est aussi observé en compression) d'une microstructure contenant un renfort de forme cubique arrondie occupant une fraction volumique de 62%. Seules les mécanismes de plasticité se produisant dans la phase γ' sont ici représentés.	209
5.19	Évolution des densités de dislocations de misfit de type glissile et sessile en fonction de la forme du précipité au début de la plasticité à 300K, 500K, 700K et 1073K.	211
5.20	Distribution des contraintes de cisaillement (σ_{xy} , σ_{xz} et σ_{yz}) au niveau de l'interface entre les phases $\gamma-Ni$ et $\gamma'-Ni_3Al$ après les étapes thermalisation à 300K (a, b et c) et 1073K (d, e et f) ; pour plus de visibilité la phase $\gamma-Ni$ est supprimée et seul le précipité $\gamma'-Ni_3Al$ et l'interface sont montrés.	212

5.21	Évolution des densités de dislocations de misfit de type glissile et sessile au niveau de l'interface entre la phase γ -Ni et γ' -Ni ₃ Al de forme cubique en fonction de la fraction volumique du précipité au début de la plasticité à 300K et 700K.	215
5.22	Évolution des densités de dislocations de misfit de type glissile et sessile au niveau de l'interface entre la phase γ -Ni et γ' -Ni ₃ Al de forme cubique arrondie en fonction de la fraction volumique du précipité au début de la plasticité à 300K et 700K.	218
A.1	Impact du modèle de champ de force sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées d'Al à température ambiante : évolution du mécanisme de plasticité obtenu avec les modèles <i>IFF</i> et <i>RMF</i> (les quatre images en haut) ; et celui obtenu avec le modèle <i>MFF</i> (les quatre images en bas) selon la direction [111] (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).	248
A.2	Impact du modèle de champ de force sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées d'Al à température ambiante : évolution du mécanisme de plasticité obtenu avec les modèles <i>IFF</i> et <i>RMF</i> (les quatre images en haut) ; et celui obtenu avec le modèle <i>MFF</i> (les quatre images en bas) selon la direction [123] (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).	249
A.3	Impact du modèle de champ de force sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées de nickel à température ambiante : comportements mécaniques obtenus avec les modèles <i>IFF</i> , <i>RMF</i> et <i>MFF</i> selon les direction [010] et [211].	250
A.4	Impact du modèle de champ de force sur le comportement mécanique des nanoparticules isolées de nickel à température ambiante : évolution du mécanisme de plasticité obtenu avec les modèles <i>IFF</i> et <i>RMF</i> (les quatre images en haut) ; et celui obtenu avec le modèle <i>MFF</i> (les quatre images en bas) selon la direction [211].	251
B.1	Comportement mécanique des systèmes γ/γ' -Ni ₃ Al/Ni à 300K : impact du chemin de thermalisation sur le comportement mécanique en compression (C) et en traction (T).	254
B.2	Comportement mécanique des systèmes γ/γ' -Ni ₃ Al/Ni à 1073K : impact de la durée de thermalisation sur le comportement mécanique en compression (C) et en traction (T).	255
B.3	Impact du <i>random seed</i> sur le comportement mécanique des nano-cubes isolés de Ni ₃ Al.	255
B.4	Comportement mécanique des systèmes γ/γ' -Ni ₃ Al/Ni : influence du <i>random seed</i> sur le comportement mécanique des microstructures contenant des renforts de forme cubique arrondie occupant des fractions volumiques de l'ordre de 48% à 300K.	256

B.5	Comportement mécanique des systèmes γ/γ' - Ni_3Al/Ni : influence du <i>random seed</i> sur le comportement mécanique des microstructures contenant des renforts de forme cubique occupant des fractions volumiques de l'ordre de 38% à 300K et à 700K.	257
C.1	Comportement mécanique des nanoparticules isolées de Ni_3Al à 500K et 1073K : évolution du mécanisme de plasticité d'un nano-cube arrondi de 15nm de taille, avec un coefficient d'arrondissement de 0.35.	260
C.2	Comportement mécanique des nanoparticules isolées de Ni_3Al à 500K et 1073K : évolution du mécanisme de plasticité d'une nano-sphère de 18.80nm de taille.	261
C.3	Comportement mécanique dans les systèmes γ/γ' - Ni_3Al/Ni à 500K : évolution du mécanisme de plasticité à l'intérieur d'un précipité de forme cubique occupant une fraction volumique de l'ordre de 49%.	262
C.4	Comportement mécanique dans les systèmes γ/γ' - Ni_3Al/Ni à 1073K : évolution du mécanisme de plasticité à l'intérieur d'un précipité de forme cubique occupant une fraction volumique de l'ordre de 49%.	263
D.1	Zones de concentration de dislocations observées dans les superalliages en traction (a-avec un paramètre de misfit positif et b-avec un paramètre de misfit négatif) et en compression (c-avec un paramètre de misfit positif et d-avec un paramètre de misfit négatif).	266
D.2	Système cohérent avec un paramètre de misfit positif : dislocations matricielles mises en mouvement au début de la plasticité en compression (b) et en traction (c). La configuration (a) correspond à celle obtenue après l'étape de thermalisation à 300K (l'axe de sollicitation est suivant la direction z (bleue : dislocations parfaites de type $1/2 \langle 110 \rangle$, verte : dislocations partielles de Shockley de type $1/6 \langle 112 \rangle$, violette : Stair-rod de type $1/6 \langle 110 \rangle$, jaune : Hirth de type $1/3 \langle 100 \rangle$, cyan : dislocations de Frank de type $1/3 \langle 111 \rangle$, rouge : autres types de dislocations).	268

LISTE DES TABLEAUX

1.1	Valeurs de coefficients de dilatation de certains alliages selon leur composition chimique : les coefficients de dilatation de $J1$ et $JW9$ sont mesurés de la température ambiante à une température de 800°C [Alman and Jablonski, 2004], ceux de $A1$ et $A6$ sont mesurés de la température ambiante à une température de 538°C [Hwang et al., 1984].	36
2.1	Valeurs obtenues avec le potentiel de [Mishin et al., 1999] pour l'Al, le Ni et le Cu [Salah, 2018]. Les valeurs sont comparées avec des données expérimentales issues de la littérature.	56
2.2	Validation du potentiel de [Du et al., 2012] : valeurs des paramètres de maille, des énergies de cohésion et des constantes d'élasticité calculées à une température proche de 0K , puis comparées avec des données expérimentales par rapport aux valeurs obtenues avec d'autres potentiels [Kittel et al., 1996] ^a , [Smithells, 2013] ^b , [Simmons et al., 1971] ^c , [Voter and Chen, 1986] ^d , [Mishin, 2004] ^e , [Weast et al., 1984] ^f , [Mauer et al., 1985] ^g , [Hultgren et al., 1973] ^h , [Barrett, 1980] ⁱ , [Brandes and Brook, 2013] ^j	58
2.3	Validation du potentiel de [Du et al., 2012] : valeurs des énergies de défauts d'empilement et de surface des énergies comparées avec des données expérimentales par rapport aux valeurs obtenues avec d'autres potentiels ([Voter and Chen, 1986] ^a , [Mishin, 2004] ^b , [Murr, 1975] ^c , [Du et al., 2012] ^d).	59
2.4	Validation du potentiel de [Du et al., 2012] : valeurs des CSF , des APB et des $SISF$ comparées avec des données expérimentales par rapport aux valeurs obtenues avec d'autres potentiels ([Karnthaler et al., 1996] ^a , [Du et al., 2012] ^b , [Voter and Chen, 1986] ^c , [Mishin, 2004] ^d).	60
2.5	Valeurs des paramètres utilisés pour l'étude du comportement mécanique des nanoparticules d'Al et de Ni avec le MFF et le RMF ; les paramètres sont issus de [Peng et al., 2010] et [Imran et al., 2012], respectivement pour l'Al et le Ni.	77
4.1	Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K , 500K , 700K et 1073K : évolution des quantités moyennes de défauts dans le précipité lors des sollicitations en compression et en traction (les barres d'erreur représentent les écarts types sur les moyennes calculées).	168

- 5.1 Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K : valeurs du module d'élasticité $E(GPa)$ qui est le même en traction et en compression, des limites d'élasticité $Y_T(GPa)$ et $Y_C(GPa)$ (en traction et en compression respectivement), du ratio Y_T/Y_C représentant l'asymétrie sur la limite d'élasticité, des résistances mécaniques $R_T(GPa)$ et $R_C(GPa)$ (en traction et en compression respectivement) et du ratio R_T/R_C représentant l'asymétrie sur la résistance mécanique en fonction du coefficient d'arrondissement du précipité. 186
- 5.2 Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 500K, 700K et 1073K : valeurs du module d'élasticité $E(GPa)$ (qui est le même en traction et en compression), des limites d'élasticité $Y_T(GPa)$ et $Y_C(GPa)$ (en traction et en compression respectivement), du ratio Y_T/Y_C représentant l'asymétrie sur la limite d'élasticité, des résistances mécaniques $R_T(GPa)$ et $R_C(GPa)$ (en traction et en compression respectivement) et du ratio R_T/R_C représentant l'asymétrie sur la résistance mécanique en fonction du coefficient d'arrondissement du précipité pour chaque température. 191
- 5.3 Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K et 700K contenant des renforts de forme cubique : valeurs du module d'élasticité $E(GPa)$ (qui est le même en traction et en compression), des limites d'élasticité $Y_T(GPa)$ et $Y_C(GPa)$ (en traction et en compression respectivement), du ratio Y_T/Y_C représentant l'asymétrie sur la limite d'élasticité, des résistances mécaniques $R_T(GPa)$ et $R_C(GPa)$ (en traction et en compression respectivement) et du ratio R_T/R_C représentant l'asymétrie sur la résistance mécanique en fonction de la fraction volumique du précipité. 200
- 5.4 Comportement mécanique du système Ni_3Al/Ni à 300K et 700K contenant des renforts de forme cubique arrondie : valeurs du module d'élasticité $E(GPa)$ (qui est le même en traction et en compression), des limites d'élasticité $Y_T(GPa)$ et $Y_C(GPa)$ (en traction et en compression respectivement), du ratio Y_T/Y_C représentant l'asymétrie sur la limite d'élasticité, des résistances mécaniques $R_T(GPa)$ et $R_C(GPa)$ (en traction et en compression respectivement) et du ratio R_T/R_C représentant l'asymétrie sur la résistance mécanique en fonction de la fraction volumique du précipité. 207

RÉSUMÉ / *Abstract*

La microstructure des matériaux multiphasés nanostructurés permet des performances thermomécaniques particulièrement intéressantes, en phase avec les besoins industriels. Le développement d'approches numériques constitue un excellent moyen d'étude de leur comportement mécanique à haute température, l'approche expérimentale étant rendu difficile compte-tenu de l'échelle d'étude nanométrique. Ainsi, la dynamique moléculaire est utilisée dans le cadre de cette thèse pour mieux comprendre et expliciter le lien entre microstructure et comportement mécanique à haute température de certains superalliages à base nickel.

Les premiers travaux réalisés sont dédiés à l'évaluation de la technique de calcul de la dynamique moléculaire. Des tests de compression sont effectués sur des nanoparticules de nickel et d'aluminium. Les résultats obtenus montrent que le modèle de champ de force le plus communément utilisé peut avoir un impact sur la réponse mécanique des nanoparticules selon la direction de chargement considérée. Les effets des parties attractive et/ou répulsive du champ de force, lors de l'interaction avec la nanoparticule, sont étudiés. Ce préambule a permis de consolider la modélisation numérique.

Cette thèse porte ensuite sur le système γ/γ' - Ni_3Al/Ni , représentation simplifiée à l'échelle nanométrique de précipités au sein de leur matrice, servant de base d'étude dans le cadre des superalliages bases nickel. L'objectif est de tenter de mieux expliquer le rôle du précipité Ni_3Al et de son interface avec la matrice dans le comportement mécanique de certains superalliages base nickel.

Le comportement mécanique de nanoparticules de Ni_3Al isolées est tout d'abord analysés. Les modes de déformations observés dépendent de la température et de l'orientation cristallographique. Les résultats sont discutés en considérant l'évolution de la contrainte, de la surface de contact et des mécanismes de plasticité en fonction de la forme, de la température et de l'orientation cristallographique.

Le comportement mécanique du système γ/γ' - Ni_3Al/Ni dans son ensemble est ensuite abordés. Des tests de compression et de traction ont été conduits à différentes températures. Les résultats obtenus font état d'une asymétrie en traction/compression sur la limite d'élasticité, en accord avec la littérature expérimentale. Cette asymétrie, de même que le comportement mécanique de manière plus globale, varient en fonction de la température, de la forme du précipité et de la fraction volumique du système γ/γ' - Ni_3Al/Ni . Les évolutions des densités de dislocations d'interface, et des contraintes issues du désaccord paramétrique de maille entre les phases γ - Ni et γ' - Ni_3Al , sont analysées en fonction de la température, de la forme du précipité et de la fraction volumique du système. De plus, la variation de la fraction volumique du précipité selon la forme du renfort et/ou la température est également étudiée. Le lien entre la microstructure à l'échelle nanométrique et certaines caractéristiques spécifiques du comportement a ainsi pu être explicité pour la première fois.

The microstructure of nanostructured multiphase materials allows particularly interesting thermomechanical performances, in line with industrial needs. The development of numerical approaches is an excellent means of studying their mechanical behavior at high temperature, the experimental approach being made difficult given the nanometric study scale. Thus, molecular dynamics is used in this thesis to better understand the link between microstructure and mechanical behavior at high temperature of some nickel-based superalloys.

The first works carried out are dedicated to the evaluation of the simulation technique of molecular dynamics. Compression tests are performed on nickel and aluminum nanoparticles. The results obtained show that the most commonly used force field model can have an impact on the mechanical response of nanoparticles depending on the loading direction considered. The effects of the attractive and/or repulsive parts of the force field, during the interaction with the nanoparticle, are studied. This preamble allowed to consolidate the numerical modelling.

This thesis then focuses on the γ/γ' -Ni₃Al/Ni system, a simplified representation at the nanometric scale of precipitates within their matrix, serving as a basis for study in the context of nickel-base superalloys. The objective is to try to better explain the role of the Ni₃Al precipitate and its interface with the matrix in the mechanical behavior of certain nickel-based superalloys.

The mechanical behavior of isolated Ni₃Al nanoparticles is first analyzed. The deformation modes observed depend on the temperature and the crystallographic orientation. The results are discussed considering the evolution of stress, contact surface and plasticity mechanisms as a function of shape, temperature and crystallographic orientation.

The mechanical behavior of the γ/γ' -Ni₃Al/Ni system as a whole is then studied. Compression and tensile tests were conducted at different temperatures. The results obtained show an asymmetry in tension/compression on the elastic limit, in agreement with the experimental literature. This asymmetry, as well as the mechanical behavior more generally, vary according to the temperature, the shape of the precipitate and the volume fraction of the γ/γ' -Ni₃Al/Ni system. The evolutions of the interface dislocation densities, and of the stresses resulting from the lattice parametric mismatch between the γ -Ni and γ' -Ni₃Al phases, are analyzed as a function of the temperature, the shape of the precipitate and the volume fraction of the system. In addition, the variation of the volume fraction of the precipitate according to the shape of the reinforcement and/or the temperature is also studied. The link between microstructure at the nanometric scale and certain specific characteristics of behavior was thus made explicit for the first time.

MOTS-CLÉS / *Keywords*

Alliages réfractaires–Propriétés mécaniques / *Heat resistant alloys–Mechanical properties*
Composites à matrice métallique / *Metallic composites*
Effets des hautes températures / *high temperatures effects*
Dynamique moléculaire / *Molecular dynamics*
Matériaux nanostructurés / *Nanostructured materials*
Microstructure (physique) / *Microstructure*
Nanoparticules / *Nanoparticles*
Nickel–Alliages / *Nickel alloys*
Plasticité / *Plasticity*

