HAL
open science

Modélisation de l'effet de taille dans le comportement élasto-viscoplastique des matériaux nanocristallins

Laurent Capolungo

To cite this version:

Laurent Capolungo. Modélisation de l'effet de taille dans le comportement élasto-viscoplastique des matériaux nanocristallins. Autre. Université Paul Verlaine - Metz, 2006. Français. NNT : 2006METZ037S . tel-01749076

HAL Id: tel-01749076

https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01749076

Submitted on 29 Mar 2018

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

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

UNIVERSITÉ DE LORRAINE

AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4
Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10
http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php
http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm

LABORATOIRE DE PHYSIQUE ET MECANIQUE DES MATERIAUX

THESE

Présentée à

Par

Laurent Capolungo

Pour l'obtention du grade de :

Docteur de l'université Paul Verlaine de METZ

SPECIALITE : Physique et Sciences pour l'ingénieur
OPTION : Mécanique

Modélisation de l'effet de taille dans le comportement élasto-viscoplastique des matériaux nanocristallins

À soutenir le 20mars 2006 devant le jury composé de :

M.Cherkaoui (Directeur de thèse), Professeur Georgia Institute of Technology
J.C. Michel (Rapporteur), LMA, Professeur Directeur de recherche CNRS
J.Molinari (Rapporteur), Professeur ENS Cachan
E.Busso, Professeur, Ecoles des mines de Paris, Directeur du centre des matériaux
A.Molinari, Professeur, Université de Metz
J.Qu, Professeur,Georgia Institute of Technology
O.Bouaziz, Arcelor, Chercheur

Remerciements

Je tiens à remercier les membres du jury, Dr.J.C. Michel, Dr. J.Molinari, Dr.E.Busso, Dr.A. Molinari, Dr. O.Bouaziz pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de prendre part à l'évaluation de mon travail de thèse.

J'aimerais aussi remercier Dr.E.Busso pour m'avoir fait profiter de son expérience, particulièrement en matière d'éléments finis, et pour les nombreuses discussions que nous avons pu avoir tout au long de ce projet.

Je remercie Dr. J.Qu de m'avoir donné la chance de poursuivre mes études de troisième cycle à la Georgia Institute of Technology. Ses conseils m'ont permis de m'adapter au système académique et à la culture américaine.

Mes pensées les plus sincères s'adressent aussi à Dr. C.Jochum qui a su me conseiller sur mon orientation professionnelle dès la fin de mes études à L'ENSIETA, m'encourager et me soutenir dans les moments les plus difficiles.

J'adresse mes remerciements les plus sincères à Dr. M.Cherkaoui qui m'a donné une chance hors du commun en acceptant de diriger mon travail de thèse. Sa motivation sans limite m'a donné goût à la recherche. Je le remercie aussi pour son investissement personnel et ses précieux conseils.

Enfin, j'aimerais conclure sur une note plus personnelle. Je tiens à remercier mes amis français et américains de ne pas avoir laissé la distance nous séparer mais aussi pour les très bons moments passés en leur compagnie. Merci à Suzy Lody d'avoir accepté de corriger les « fautes » d'orthographe et de grammaire qui s'étaient introduites dans ce document.

Je remercie aussi mon frère David qui, malgré l'éloignement a toujours été à mes cotés et m'a fait profiter de ses expériences passées. Merci aussi pour nos désormais traditionnelles vacances de fin d'année qui nous ont permis de nous rapprocher plus encore.

Enfin, Je remercie mes parents pour la confiance qu'ils ont placée en moi dès mon plus jeune âge et pour le soutien moral qu'ils ont su m'apporter. Cette thèse est en quelque sorte le fruit de leurs nombreuses années de sacrifices, aussi ce document leur est dédié.

A mes parents…

Chapitre I. Introduction générale - 1 -

A. Problématique - 3 -

B. Outils d'études - 5 -

C. Objectifs et stratégie - 7 -

Chapitre II. Etat de l'art - 13 -

A. Les matériaux conventionnels. - 13 -
1. L'activation thermique - 14 -
2. Le stockage des dislocations - 16 -
3. L'annihilation des dislocations - 17 -

B. Les matériaux nanocristallins - 19 -
1. Procédés de fabrication - 19 -
   a) *Condensation* par gaz inertes (CGI) - 20 -
   b) Broyage à boulets - 21 -
   c) Forte déformation plastique - 22 -
      (1) ECAP - 23 -
      (2) HPT - 24 -
   d) Electrodéposition - 25 -
2. Structure et observations - 26 -
   a) Les cristaux - 27 -
   b) Les joints de grains et lignes triples - 28 -
3. Comportement des matériaux NC - 30 -
4. Discussion: - 31 -

C. Modélisation des joints de grains. - 32 -
1. Modèle basé sur les dislocations. - 33 -
2. Modèle des unités structurelles - 35 -
3. Modèle basé sur les désinclinaisons - 38 -
   a) Rappel - 38 -
   b) Champ de contraintes associées à une désinclinaison cale. - 39 -
   c) Les modèles - 40 -

D. Mécanismes de déformation - 41 -
1. Lien avec la superplasticité - 41 -
2. Fluage de Nabarro Herring - 43 -
3. Fluage de Coble - 44 -
4. Glissement des joints de grains - 46 -
5. Emission de dislocations par les joints de grains: - 47 -
6. Modèles - 50 -
   a) Modèles de Kim et al. - 51 -

Chapitre III. Réfléxions - 60 -

A. L'activité des dislocations - 60 -

B. Carte de déformation - 62 -

Chapitre IV. Effet des mécanismes de diffusion - 66 -

A. Effet de la diffusion de Coble - 66 -
1. Comportement des inclusions - 68 -
2. Comportement de la phase matrice - 70 -
3. Le matériau effectif - 70 -
4. Résultats - 71 -
   a) Evaluation des constantes - 72 -
   b) Comportement des inclusions - 72 -
   c) Comportement de la matrice - 75 -
   d) Comportement macroscopique du matériau - 76 -
   e) Discussion - 79 -

B. L'effet du mécanisme de glissement de Lifschitz - 80 -
1. Comportement des inclusions - 81 -
2. Comportement de la phase matrice - 81 -
3. Comportement macroscopique du matériau - 82 -
4. Résultats - 82 -

Chapitre V. Modélisation de l'émission de dislocations - 86 -

A. Modèle continu - 86 -
1. Comportement de la phase inclusionnaire - 87 -
2. Discussion: - 90 -
3. Loi de comportement de la phase matrice - 94 -
4. Transition d'échelles - 98 -
5. Résultats - 99 -
   a) Evaluation de constantes - 99 -
   b) Effet de taille - 101 -
   c) Comportement en fluage - 107 -
   d) Discussion: - 109 -

B. Lien entre la dynamique moléculaire et le modèle continu - 109 -
1. Rappel de dynamique moléculaire - 109 -
2. Les simulations - 112 -
3. Résultats - 113 -
   a) Bicristal parfait - 113 -
   b) Effet d'un ledge - 115 -
   c) Comparaison des sources de dislocations - 117 -

C. Application éléments finis - 118 -
1. Discussion - 124 -

Chapitre VI. Modèle basé sur la plasticité cristalline - 127 -

A. Rappel - 127 -

B. Extension au cas de l'émission/pénétration - 131 -

Conclusions et perspectives - 138 -

Annexe: La transition d'échelle - 1 -

Annexe du Chapitre IV: Effet des mécanismes de diffusion - 19 -

Annexe du chapitre V: Modélisation de l'émission de dislocations - 30 -

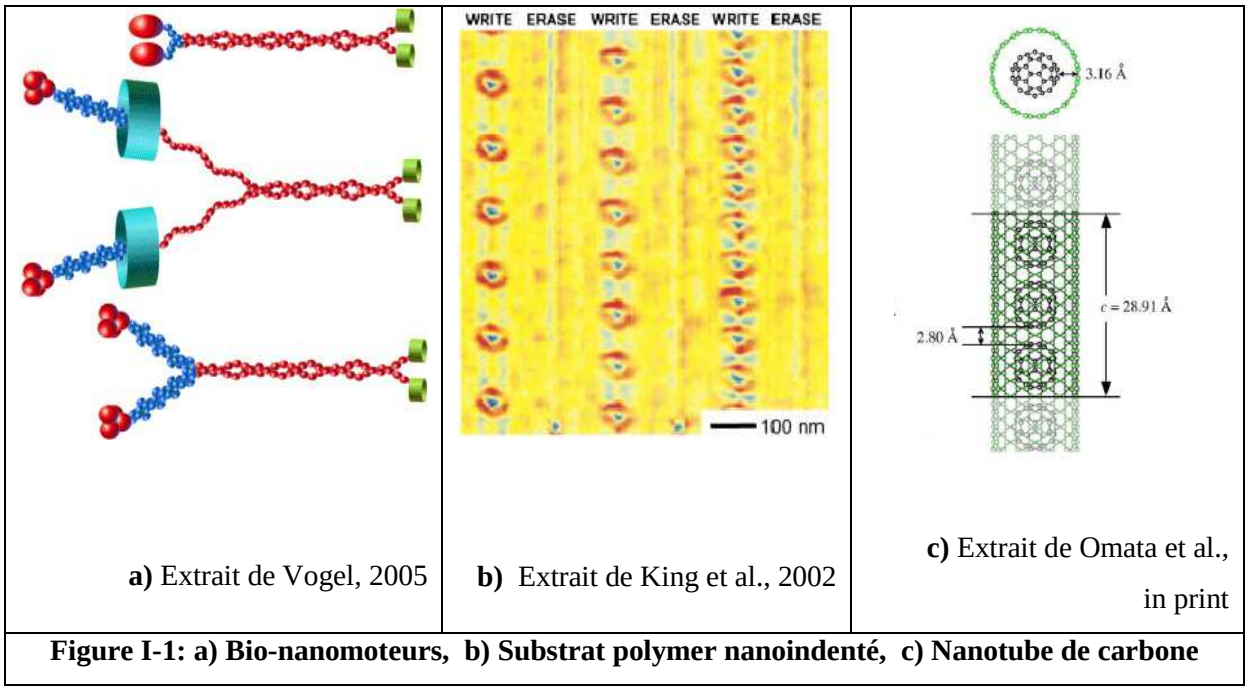
Chapitre I. Introduction générale

La récente apparition des nanotechnologies (NT) a suscité un intérêt profond dans la communauté scientifique tout comme dans l'industrie, durant ces dix dernières années. Les NT sont déjà perçues comme précurseurs d'une probable révolution technologique. Notamment car elles pourraient mener à la création de nouveaux matériaux ayant des propriétés remarquables (e.g. limite d'élasticité, conductivité) permettant la réduction du volume et de la masse de systèmes complexes. Ce qui représente évidemment un enjeu économique non négligeable.

Définissons tout d'abord ce que l'on entend par nanotechnologie: **toute machine, cellule, ou matériau ayant une longueur caractéristique de l'ordre de plusieurs nanomètres (1.E-9m) peut être apparenté à la famille des nanotechnologies.** Il est très important de se représenter la petitesse du nanomètre. Réalisons qu'une balle de ping-pong est environ cent millions de fois plus grande qu'une sphère de diamètre 1 nanomètre.

Si les NT sont récentes, le concept de NT date lui de plus de 40 ans. Richard Feynman en 1959, dans un discours intitulé « There is plenty of room at the bottom » présenté lors d'un meeting annuel de la société de physique américaine, discutait de la possibilité d'inscrire et de lire les 24 volumes de l'Encyclopedia Brittanica sur une tête d'épingle.

Bien que très peu d'applications technologiques basées sur les NT n'aient encore été développées, certaines avancées encourageantes ont déjà été réalisées. Dans le domaine de la médecine, citons par exemple les travaux de Vogel (Vogel 2005) sur les bio-nanomoteurs, qui sont des protéines ou des groupements de protéines assurant certaines fonctions vitales pour les cellules humaines telle que la reproduction (voir (Figure I-1a)). De même, des études à l'échelle nanométrique ont déjà permis de visualiser et de modéliser l'exocitose durant laquelle une cellule porteuse d'un neurotransmetteur transmet ce dernier à une cellule réceptrice. Dans un domaine tout autre, le stockage de données aussi (voir Figure I-1b)), pourrait être très fortement amélioré avec la technique de nanoindentation par microscope à force atomique avec poutre cantilever (se référer aux travaux de King et al. (King et al. 2002)). Enfin, de nombreux nanomatériaux présentant des caractéristiques exceptionnelles ont été produits lors de cette dernière décade. Citons les excellentes propriétés magnétiques de nano particules d'oxyde de fer produites par Wang et al. (Wang et al. 2004) ou les propriétés mécaniques et électriques remarquables des nanotubes de carbone (NTC) (Omata et al.)



a) Extrait de Vogel, 2005 | **b)** Extrait de King et al., 2002 | **c)** Extrait de Omata et al., in print

Figure I-1: a) Bio-nanomoteurs, b) Substrat polymer nanoindenté, c) Nanotube de carbone

Avec la découverte des NT, de nombreux problèmes d'ordres théoriques et technologiques sont apparus. Reprenons l'exemple des NTC, pour lesquels on rapporte des valeurs du module d'Young de l'ordre de plusieurs Terra Pascal (cette propriété dépend évidemment du type de nanotube, i.e. le nombre de couches, la chiralité…), ce qui a donné lieu à de nombreux projets d'envergure, le plus connu étant le « space elevator » fondé par la NASA qui consiste à fabriquer des poutres en NTC de plusieurs kilomètres de longueur qui serviraient de rampe d'ascenseur. Pratiquement, avec les procédés de fabrication actuels, les NTC ne dépassent que très rarement plus de quelques micromètres de longueur (Li et al. 2005) et leur concaténation n'est pas encore réalisable. De plus, les prédictions théoriques du module d'Young, réalisées pour la plupart par simulation de dynamique moléculaire (DM), surestiment largement les valeurs mesurées expérimentalement. Ainsi, dans le cas des NTC, un effort conséquent doit être apporté si bien d'un point de vue expérimental que d'un point de vue théorique. D'une manière générale, c'est le cas de la majeure partie des nano machines et nanomatériaux.

De plus, des phénomènes physiques ne se manifestant que dans le domaine du « nano » ont été découverts. Et pour la plupart, les modèles développés jusqu'alors ne sont plus applicables. C'est le cas du phénomène de croissance anormale des grains des matériaux polycristallins à grains nanométriques (Moelle et al. 1995). Ici encore, la compréhension de ses nouveaux phénomènes nécessite le développement de modèles théoriques.

Concentrons nous désormais sur le cas des nanomatériaux (NM). Comme décrit par H.Gleiter, pionnier dans le domaine, les NM peuvent être classifiés en 12 catégories en fonction de leur composition chimique et de la forme de leur cristaux (Gleiter 2000). Dans le cadre de ce travail de thèse, seuls les

matériaux purs composés de cristaux à structure cubique face centrée (C.F.C.) orientés de manière equi-axiale seront étudiés. On se réfère à ces matériaux comme étant nanocristallins (NC).

A. Problématique

Les matériaux polycristallins à tailles de grains conventionnels (de l'ordre du micron) connaissent une évolution de leur limite d'élasticité, 'σ_y', en fonction de la taille de grain, décrite par la loi empirique de Hall et Petch ((Hall 1951; Petch 1953)) donnée par :

$$\sigma_y = \sigma_0 + \frac{K^{HP}}{\sqrt{d}} \qquad (1.1.1)$$

Ici, σ_0 est un terme de friction, 'd' définit la taille de grain et, K^{HP} est la pente de Hall Petch. Cette dernière dépend de l'interaction entre dislocations immobiles. Ainsi, une diminution de la taille de grain entraîne une augmentation de la limite d'élasticité.

Quatre types de conceptualisations ont été développés pour modéliser la loi de Hall et Petch. Chacune d'entre elles tient compte de l'interaction des dislocations sessiles avec les joints de grains. La première approche fût introduite par Petch et se base sur la propagation inter grains des contraintes localisées au niveau des joints de grains, jouant un rôle passif de barrière au mouvement de dislocations, dues à des empilements de dislocations (Petch 1953). Cependant, ce modèle se révèle invalidé par le fait que les matériaux à structure cubique centrée obéissent aussi à la loi de Hall et Petch alors que le mécanisme d'empilement de dislocations n'est pas actif dans ce type de structure.

En 1963, Li, supposant l'indépendance de la densité de ledges (dont le concept sera introduit dans l'état de l'art) par rapport à la taille de grain, a proposé un modèle basé sur le champ de contraintes localisé à proximité des joints de grains et causé par les forets de dislocations de Taylor induites par l'émission de dislocations par les ledges (Li 1963). Dans ce modèle, la densité de ledges est liée à l'angle d'inclinaison entre les deux cristaux définissant le joint de grain. Cet angle d'inclinaison est lui-même lié à la densité de dislocations stockées dans les forets de type Taylor. Murr et de Venkatesh ont investigué la validité du modèle proposé par Li et, bien qu'une forte dépendance de la limite d'élasticité à la densité de ledges fut révélée par le biais de mesures par microscope électronique conventionnel (MEC), il fût aussi montré que la présence et le nombre de ledges dans le matériau dépendent fortement du procédé de fabrication et dans une moindre mesure de la taille de grain, invalidant ainsi le model de Li. Notons tout de même que ce modèle a permis de découvrir le mécanisme d'émission de dislocations par les joints de grain. Ce qui fût aussi observé

par Murr et Venkatesh (Murr 1981). Malheureusement, il existe relativement peu de travaux consacrés à ce mécanisme.

Enfin, la loi de Hall et Petch peut aussi être recouvrée par le raisonnement de Ashby (Ashby 1970), dans lequel la limite d'élasticité dépend de la densité de dislocations immobiles, relation donnée par Taylor (Taylor 1934), qui est reliée à la taille de grain en utilisant le concept de similitude introduit par Kuhlman-Wisdorf (Kuhlman-Wilsdorf 1962). Dans ce dernier, on établit des relations de proportionnalité entre des longueurs caractéristiques du matériau, telle que le libre parcours moyen des dislocations et l'épaisseur des murs des cellules localisées dans les grains.

Les développements les plus récents, basés sur le gradient de déformation due à la présence de dislocations géométriquement nécessaires dans les joints de grains, permettent aussi de prédire avec succès la dépendance de la contrainte d'écoulement avec la taille de grain (Gao et al. 1999b; Gao et al. 1999a).

Vers la fin des années 1980, de nouvelles techniques permettant la fabrication de matériaux polycristallins composés de cristaux de dimensions inférieures à 100 nm ont été mises au point (e.g. cristallisation à partir d'un verre métallique…). Avec la loi de Hall et Petch, suggérant une possibilité d'augmentation notable de la limite d'élasticité, naît le désir de raffiner la structure des matériaux. Un phénomène très intéressant fût alors observé expérimentalement. Lorsque la taille de grain est inférieure à une taille critique, généralement située dans les environs de 20 à 30 nm (Weertman 1993; Conrad et al. 2000), la loi de Hall et Petch ne s'applique plus et l'on observe une diminution de la pente de Hall et Petch qui peut même devenir négative (Schuh et al. 2002), on parle alors de la 'chute' de la loi de Hall et Petch (voir Figure I-2). La contrainte d'écoulement plastique n'étant pas une propriété intrinsèque du matériau, elle dépend par exemple de l'histoire du chargement du matériau, la chute de la loi de Hall et Petch suggère qu'un mécanisme autre que ceux opérant dans les matériaux conventionnels devient alors actif lorsque la taille de grains est nanométrique, ou que la microstructure connaît une dépendance avec la taille de grain.

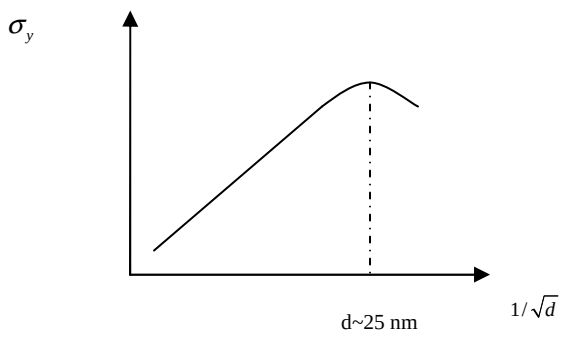


Figure I-2: Schéma de l'évolution de la limité d'élasticité avec la taille de grain

Les modèles décrivant la loi de Hall et Petch cités ci-dessus ne permettent pas de prédire ce phénomène. Tenant compte des nombreuses difficultés liées à la fabrication de matériaux nanocristallins (présence de fissures, cohésion des grains…), on réalise alors la nécessité de développer des modèles adaptés, permettant de prédire l'effet de taille dans le comportement des matériaux NC qui se manifeste notamment par la chute de la loi de Hall et Petch.

Eliminons dès à présent l'hypothèse qui fût formulée dans les premières études sur les matériaux NC. L'épaisseur des joints de grains ne varie pas avec la taille de grains, typiquement des valeurs d'environ 1 nm sont rapportées (Kim et al. 2000). Ainsi, une diminution de la taille de grain entraîne une augmentation de la fraction volumique de joints de grains et de lignes triples. Il fût alors suggéré, notamment dans les travaux de Birringer (Birringer 1989), que le comportement 'anormal' des matériaux NC est lié à un changement de la structure des joints de grains, qui seraient alors amorphes. Cette hypothèse fût l'objet de nombreuses études expérimentales et simulations de dynamique et de statique moléculaire (DM et SM) (Van Swygenhoven et al. 2001; Kumar et al. 2003). Entre autre, il fût conclu que bien que les lignes triples présentent un désordre atomique important, la structure des joints de grains ne peut être considérée amorphe. Ces derniers présentent le plus souvent des structures à facettes où les distances interatomiques dépendent de la taille de grain. Ainsi, les plus récentes études se consacrent désormais à l'investigation de nouveaux mécanismes de déformation pouvant apparaître dans les matériaux NC.

La recherche sur les matériaux NC évolue très rapidement. Un nombre important de publications paraît chaque année traitant de la structure, des mécanismes de déformation ou même de la modélisation du comportement des matériaux NC. Il existe par ailleurs encore un grand nombre de sujets de débats, notamment sur la diffusion de lacune à laquelle nous consacrerons un chapitre, et peu de concepts communément admis. Il s'avère donc nécessaire de comprendre les subtilités de chaque type d'étude.

B. Outils d'études

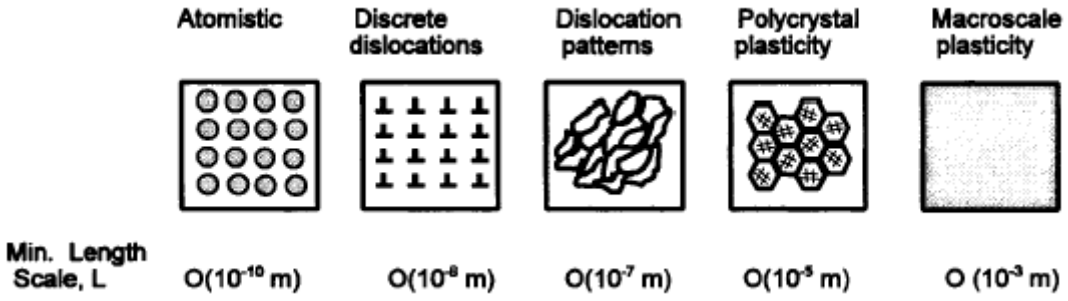
Nous caractériserons avec précision dans les prochains chapitres les différents outils permettant l'étude des nanomatériaux. Nous présentons ici brièvement leur limitations et principes.

Trois approches complémentaires sont nécessaires à la compréhension de l'effet de taille dans le comportement des matériaux polycristallins : (1) l'expérimentation, (2) les modélisations numériques, notamment via la DM et SM qui s'avèrent cruciales du fait des caractères très locaux des phénomènes observés, et (3) les modèles analytiques.

L'expérience fournit évidement la base sur laquelle les modèles numériques et analytiques vont se fonder. Cependant, de nombreuses difficultés sont liées à la fabrication, à l'observation, et à la mesure du comportement des matériaux NC. Dans le cas de la fabrication, les 5 procédés les plus couramment mis en oeuvre, produisent tous un matériau contenant des défauts qui sont propres au procédé de fabrication, ce qui a une grande influence sur le comportement du matériau et nuit par conséquent à la reproductibilité des résultats. De plus, les échantillons sont de très petites dimensions, typiquement on obtient des cylindres de 10 mm de diamètre et 15 mm de longueur (Khan et al. 2000), ce qui nécessite souvent la fabrication d'outillage adapté pour la mesure du comportement du matériau. Enfin, l'observation microstructurale, réalisée le plus souvent par MEC est limitée par la nature même du microscope. En effet, dans le cas du MEC, la procédure repose sur l'émission d'électrons qui sont diffractés par les atomes de la matière investiguée et permettent d'obtenir une figure de diffraction. Cette dernière correspond à la transformée de Fourier de l'interaction inter atomique décrite par un potentiel supposé connu, et l'image du matériau s'obtient donc par transformé de Fourier inverse de la figure de diffraction. Bien que le MEC soit un outil extrêmement performant dans la mesure où il permet une observation du matériau à l'échelle atomique, cette méthode est elle aussi limitée. En effet, comme rappelé ci-dessus, aucune observation n'est possible si l'on ne peut obtenir de figure de diffraction. Ainsi l'épaisseur des échantillons est limitée par l'énergie nécessaire aux électrons pour traverser le matériau. Typiquement les échantillons ont une épaisseur inférieure à 30 nm ce qui peut engendrer des phénomènes de relaxations limitant la caractérisation du matériau. Ainsi, en vue des arguments présentés ci-dessus, un grand soin doit être apporté à l'étude des résultats expérimentaux qui présentent le plus souvent des différences conséquentes.

Dans le cas des simulations numériques, l'augmentation de la puissance des processeurs et de l'espace de stockage permet désormais de simuler le comportement d'un nombre fini d'atomes par des calculs de DM et SM. Ainsi, on peut observer d'une manière dynamique le mouvement des atomes d'un cristal et visualiser par exemple un glissement de dislocation. La DM et SM souffrent de limitations conséquentes liées à leurs grandes consommations de ressources informatiques. Entre autres, les simulations de dynamique et de statique moléculaire ne peuvent prendre en compte qu'un nombre limité d'atomes, avec un maximum d'environ 500 000 atomes, même si des conditions de périodicité peuvent être appliquées aux limites. Dans le cas de la DM, afin d'obtenir une modélisation permettant de caractériser des comportements plastiques, il est nécessaire d'imposer des chargements irréalistes, tels que des taux de déformation de l'ordre de 1.E7/s ou des contraintes de plusieurs GPa., et l'on ne peut simuler plus de quelques picosecondes de temps réel (~200 ps au maximum). Ces limitations résultent du fait que le pas de temps de calcul doit être inférieur à la période de vibration des atomes (de l'ordre de la femtoseconde) pour ne pas engendrer de collision d'atomes. Comme on le verra dans un prochain chapitre, le calcul des champs de contrainte à partir du théorème de Virial pose lui aussi un problème fondamental. De plus, les simulations ne peuvent être opérées qu'à température ou vitesse de déformation constante, ce qui constitue des cas limites. Enfin, la complexité des microstructures réelles est telle qu'il devient délicat voir même

impossible de les recréer numériquement. Il serait donc avisé de considérer la DM et la SM comme des outils de calcul puissants mais dangereux, dans le sens où les prédictions de DM peuvent révéler des phénomènes qui ne sont pas caractéristiques du comportement du matériau modélisé.



Extrait de (McDowell 2000)

Figure I-3: Schéma des échelles de résolution de la plasticité/viscoplasticité

Les études expérimentales et les simulations numériques nous fournissent des informations à l'échelle atomique sur les mécanismes de déformations plastiques. Cependant, comme rappelé par Mc Dowell (McDowell 2000), la seconde difficulté résulte du changement d'échelle nécessaire à la quantification de l'effet macroscopiques de ces mécanismes (voir Figure I-3). La transition d'échelle ne peut se réaliser qu'à partir de modèle analytiques, tels que la micromécanique, où de l'utilisation de code de calcul par éléments finis. Et ces deux techniques de transition d'échelle connaissent elles aussi des limitations connues.

C. Objectifs et stratégie

Dans ce travail de thèse, l'effet de taille sur le comportement élasto-viscoplastique des matériaux polycristallins purs à structure cubique face centrée est étudié. Nous restreignons cette étude aux comportements quasi-statique, l'effet de la température sera brièvement étudié ainsi que le comportement en fluage.

Nous poursuivons ici deux objectifs (Figure I-4); le premier étant l'identification et la modélisation des mécanismes de déformation engendrant le comportement dit anormal des nanomatériaux. L'étape d'identification des mécanismes de déformation opérationnels dans les matériaux NC est entièrement basée sur l'analyse et la discussion de travaux expérimentaux et de simulations numériques disponibles dans la littérature. Grâce à cette première étape de modélisation des mécanismes, une carte de déformation pourra être établie. Le second objectif de ce travail de thèse consiste lui à développer des outils numériques

puissants et adaptable à de futurs travaux de recherche, permettant de modéliser de façon la plus réaliste le comportement des matériaux NC.

Etant donné le peu de connaissances communément admises dans le domaine des matériaux NC, nous privilégions une approche prudente qui consiste d'une part à modéliser séparément les phénomènes supposés actifs dans les nanomatériaux et d'autres part à augmenter graduellement le raffinements de nos approches. Ce travail de thèse est organisé comme suit:

L'état de l'art, qui sera l'objet du chapitre II, est consacré principalement à la présentation détaillée des connaissances actuelles sur les matériaux nanocristallins et, dans une moindre mesure, à la présentation des mécanismes de déformation plastique des matériaux conventionnels à structure CFC .

Le chapitre III présente une réflexion portant sur les mécanismes de déformation supposés actifs dans les matériaux NC. Le fruit de ce chapitre est une première carte des mécanismes de déformation (fluage de Coble, fluage de Nabarro Herring, glissement des joints de grains..) qui est étudiée dans la suite de ce travail de thèse.

Dans le chapitre suivant, nous proposons une première approche permettant d'évaluer l'effet des mécanismes de diffusions sur le comportement des matériaux NC. Dans un premier temps nous ne considérons que le mécanisme de fluage de Coble (Coble 1963), décrivant le mouvement de lacunes en régime établi le long des interfaces grains/joints de grains. L'activité du mécanisme de fluage de Coble a été suggérée par les toutes premières études expérimentales sur les matériaux NC. Ce premier modèle est basé sur une approche composite à deux phases. La phase inclusionnaire représente les cœurs de grains. Ces derniers ont un comportement élasto-viscoplastique, engendré par le glissement des dislocations, décrit avec le formalisme développé par Kim et al. (Kim et al. 2000). La phase matrice est décrite d'une manière simple à l'aide d'une loi de comportement élastique plastique parfait. Ce choix étant motivé par le peu d'informations alors disponibles concernant le comportement des joints de grains. Cette approche est ensuite étendue au cas du mécanisme de glissement de Lifschitz, traduisant du glissement des joints de grains accommodé par mouvements de lacunes. Tout comme le mécanisme de fluage de Coble le mécanisme de glissement des joints de grains a été observé expérimentalement et à fait l'objet de nombreuses discussions portant notamment sur le fait qu'il soit où non accommodé par des transfert de masse dans les joints de grains. La transition d'échelle est réalisée à l'aide d'un schéma autocohérant de type Kroner.

Le chapitre V est dédié à la modélisation de l'effet de l'émission de dislocations pas les joints de grain. Bien qu'introduit il y a plus de 40 ans, ce mécanisme n'a été que très peu étudié et il n'existe pas encore de modèle prédisant l'effet macroscopique de l'émission de dislocations. Motivés par de nombreuses

simulations de DM récentes, suggérant que le mécanisme d'émission de dislocations soit opérationnel dans les matériaux NC, nous proposons une loi de comportement traduisant l'effet combiné de l'émission de dislocations par les joints de grains et de la pénétration de dislocations dans les joints de grains. Le modèle est le fruit d'une réflexion de fond justifiant l'activité des sources intergranulaires dans les matériaux NC. Dans un premier temps les constantes nécessaires sont estimées à partir de modèles théoriques et de simulations numériques. Dans un second temps les constantes du modèle sont évaluées à partir de simulations de DM. Ces dernières révèlent que les principales sources de dislocation intergranulaires sont des ledges, que l'on pourra définir comme des plans d'atomes supplémentaires présent dans les joints de grain et définissant des marches. Enfin les simulations révèlent aussi que contrairement à l'hypothèse de Li, les ledges ne sont pas de simples donneurs de dislocations mais de véritables sources de dislocations. L'effet macroscopique des mécanismes d'émission et de pénétration des dislocations est obtenu à l'aide d'une approche composite à deux phases. La phase matrice représente les joints de grains et les lignes triples et tiens compte du mécanisme d'émission de dislocations par les joints de grains. La phase inclusionnaire représente les cœur des grains dont la déformation plastique est engendré par le glissement des dislocations. Le formalisme typique décrivant l'écrouissage (Kocks et al. 1975; Mecking et al. 1981; Kocks et al. 2003) est modifié afin de prendre en compte l'effet des contraintes à distances exercées par les joints de grain sur les ligne triples. Le modèle permet d'évaluer l'effet de taille, l'effet du taux de déformation et de la température sur le comportement en traction simple du matériau. Nous y démontrons entre autre que l'émission et le pénétration de dislocations dans les joints de grains peuvent être responsable de la chute de la loi de Hall et Petch. De plus, le comportement en fluage du matériau est simulé. Les résultats sont en accords avec les résultats expérimentaux les plus récents. Ces derniers révèlent que les matériaux NC ont un comportement en fluage semblable aux matériaux conventionnels. Enfin le chapitre est conclu par l'implémentation des lois de comportements développées précédemment dans un code de calcul par éléments finis (Abaqus). Les simulations de traction révèlent l'importance de l'orientation des joints de grains mais aussi que les lignes triples sont sujettes à de très fortes concentrations de contraintes.

Afin de décrire avec plus de précision le mécanisme d'émission de dislocations par les joints de grain et le mécanisme de pénétration de dislocations dans les joints de grain, un modèle basé sur la plasticité cristalline est présenté au chapitre IV. Ainsi, dans ce modèle raffiné nous différencions les contributions des dislocations géométriquement nécessaires de celles des dislocations statistiquement présentes. Cette modélisation permettra d'évaluer l'effet de l'orientation relative des joints de grains ainsi que l'effet de texture dans les matériaux NC. Ces derniers pouvant en effet présenter une forte texture suivant le procédé de fabrication. Seul le formalisme du modèle est présenté et son implémentation fera l'objet de la suite ce travail de thèse.

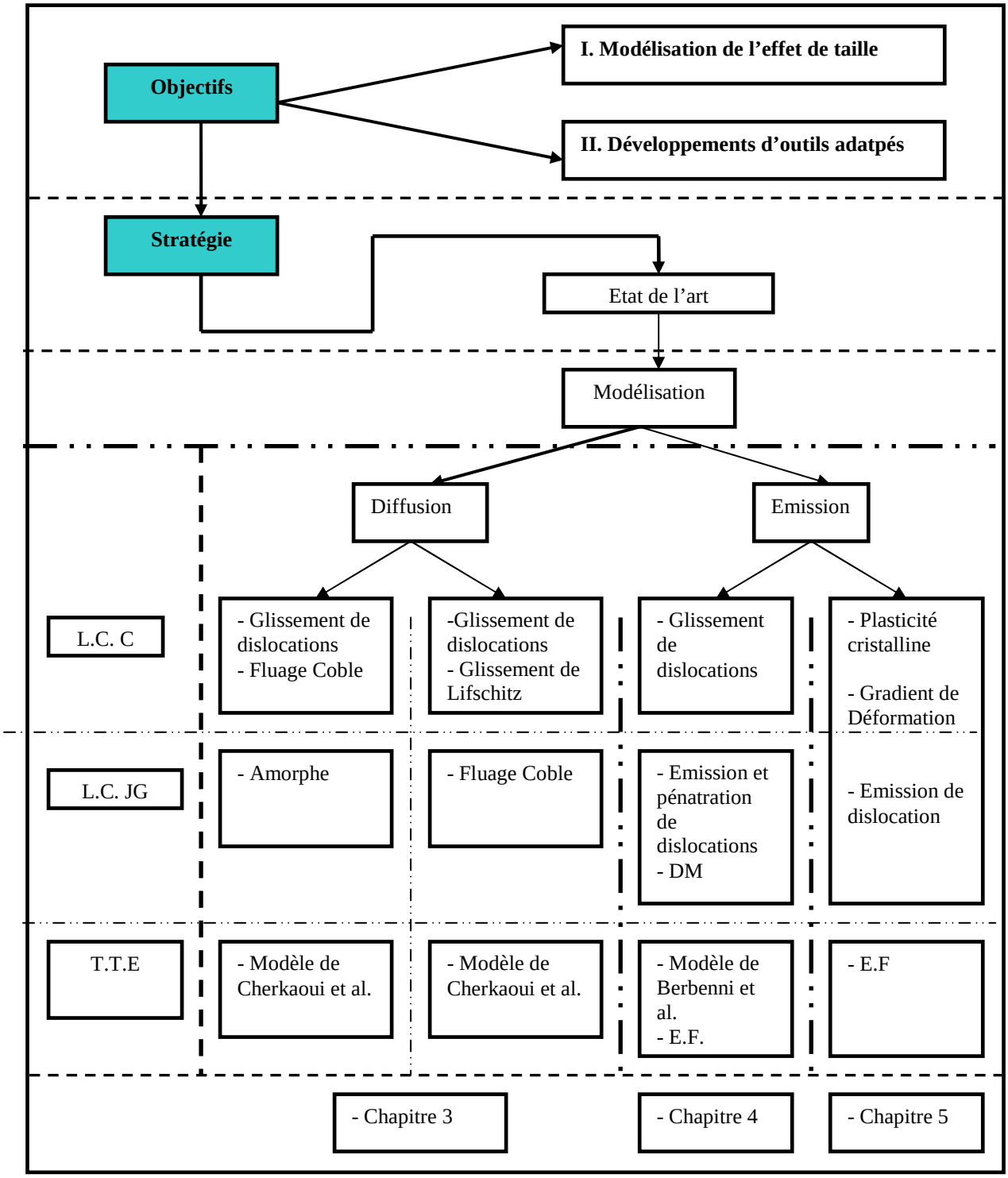


Figure I-4: Objectifs et stratégie de recherche.

Nomenclature : L.C.C. : loi de comportement des cristaux, L.C.JG : loi de comportement de joints de grains, T.T.E. technique de transition d'échelle, DM : dynamique moléculaire, E.F. : éléments finis

Références partielles

Ashby, M. F. (1970). "The deformation of plastically non homogeneous materials." Philosophical magazine **21**: 399-424.

Berbenni, S., V. Favier, et al. (2004). "Micromechanical modeling of the elastic viscoplastic behavior of polycrystalline steels having different microstructures." Materials science and engineering **A372**: 128-136.

Birringer, R. (1989). "Nanocrystalline materials." Materials Science and Engineering A **117**: 33-43.

Cheng, S., E. Ma, et al. (2005). "Tensile properties of in situ consolidated nanocrystalline Cu." Acta Materialia **53**(5): 1521-1533.

Cherkaoui, M., Q. Sun, et al. (2000). "Micromechanics modeling of composite with ductile matrix and shape memory alloy reinforcement." International journal of solids and structures **37**: 1577-1594.

Coble, R. L. (1963). "A model for boundary diffusion controlled creep of polycrystalline materials." Journal of applied physics **34**: 1679-1682.

Conrad, H. and J. Narayan (2000). "On the grain size softening in nanocrystalline materials." Scripta materialia **42**: 1025-1030.

Estrin, Y. and H. Mecking (1984). "A unified phenomenolgical description of work hardening and creep based on one parameter models." Acta metallurgica **32**: 57_70.

Gao, H., Y. Huang, et al. (1999a). "Mechanism based strain gradient plasicity II Analysis." Journal of the Mechanics and Physics of Solids **47**: 1239-1263.

Gao, H., Y. Huang, et al. (1999b). "Mechanism based strain gradient plasticity I. Theory." Journal of the Mechanics and Physics of Solids **47**: 1239-1263.

Gleiter, H. (2000). "Nanostructured materials: Basic concepts and microstructure." Acta materialia **48**: 1-29.

Hall, E. O. (1951). "The deformation and aging of mild steel." Proceedings of the Physical society of London **B64**: 747-753.

Khan, A. S., H. Zhang, et al. (2000). "Mechanical response and modeling of fully compacted nanocrystalline iron and copper." International journal of plasticity **16**: 1459-1476.

Kim, H. S., Y. Estrin, et al. (2000). "Plastic deformation behaviour of fine grained materials." Acta materialia **48**: 493-504.

King, W. P. and K. E. Goodson (2002). "Thermal Writing and Nanoimaging With a Heated Atomic Force Microscope Cantilever." Journal of Heat Transfer **124**(4): 597.

Kocks, U. F., U. F. Argon, et al. (1975). Progress in materials science **19**: 110-170.

Kocks, U. F. and H. Mecking (2003). "Physics and phenomenology of strain hardening." Progress in materials science **48**: 171-273.

Kuhlman-Wilsdorf, D. (1962). Trans Met Soc AIME **218**: 962.

Kumar, K. S., S. Suresh, et al. (2003). "Deformation of electrodeposited nanocrystalline nickel." Acta materialia **51**: 387-405.

Li, J. C. M. (1963). "Petch relation and grain boundary sources." Transactions of the metallurgical society of AIME **227**: 239-247.

Li, J. L., G. Z. Bai, et al. (2005). "Microstructure and mechanical properties of hot-pressed carbon nanotubes compacted by spark plasma sintering." Carbon **43**(13): 2649-2653.

McDowell, D. L. (2000). "Modeling and experiments in plasticity." International Journal of Solids and Structures **37**(1-2): 293-309.

Mecking, H. and U. F. Kocks (1981). "Kinetic of flow stress and strain hardening." Acta metallurgica **29**: 1865-1875.

Moelle, C. H. and H. J. Fecht (1995). "Thermal stability of nanocrystalline iron prepared by mechanical attrition." Nanostructured Materials **6**(1-4): 421-424.

Murr, L. E. (1981). "Strain induced dislocation emission from grain boundaries in stainless steel." Materials science and engineering **51**: 71-79.

Omata, Y., Y. Yamagami, et al. "Nanotube nanoscience: A molecular-dynamics study." Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **In Press, Corrected Proof**.

Petch, N. J. (1953). "The cleavage strength of polycrystals." Journal of iron steel Inst. **174**: 25-28.

Schuh, C. A., T. G. Nieh, et al. (2002). "Hall Petch Breakdown manifested in abrasive wear resistance of nanocrystalline nickel." Scripta materialia **46**: 735-740.

Taylor, G. I. (1934). "The mechanism of plastic deformtion of crystals: Part 1 theoretical." Proceedings of the Royal Society A **CXLV**(362-387).

Van Swygenhoven, H., A. Caro, et al. (2001). "Grain boundary structure and its influence on plastic deformation of polycrystalline FCC metals at the nanoscale: a molecular dynamics study." Scripta materialia **44**: 1513-1516.

Vogel, P. D. (2005). "Nature's design of nanomotors." European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics **60**(2): 267-277.

Wang, J., K. Zhang, et al. (2004). "Magnetic properties improvement in Fe3O4 nanoparticles grown under magnetic fields." Journal of Crystal Growth **266**(4): 500-504.

Weertman, J. R. (1993). "Hall-Petch strengthening in nanocrystalline metals." Materials Science and Engineering A **166**(1-2): 161-167.

Chapitre II. Etat de l'art ***Equation Chapter 2 Section 1***

Ce chapitre de revue de la littérature comporte deux sections. Dans un premier temps, nous nous consacrerons aux matériaux conventionnels et nous rappèlerons brièvement la signification physique des formalismes d'écriture des mécanismes thermiquement activés, et le rôle des mécanismes de stockage et d'annihilation des dislocations. La seconde section de ce chapitre est quant à elle dédiée au matériaux NC. Nous y décrirons les procédés de fabrication (e.g. condensation par gaz inertes, broyage à boulets…), la structure des matériaux NC ainsi que leurs comportement. Par la suite, nous présenterons les différents types de modèles disponibles permettant de décrire la structure des joints de grains (e.g modèle de unité de dislocations, modèle des unités de désinclinaisons) qui comme nous l'avons suggéré au chapitre précédent ont une importance capitale dans les matériaux NC. Suite à cela, nous présenterons dans le détail les mécanismes de déformations pouvant être responsable du comportement « anormal » des matériaux NC, tels que le mécanisme de fluage de Nabarro Herring. Enfin, ce chapitre sera conclu par une critique des modèles existant.

A. Les matériaux conventionnels.

Le comportement élasto-viscoplastique des matériaux conventionnels a été l'objet d'études approfondies dès les années 1900 (W. 1898; Loss 1901; Nishikawa et al. 1920). Ainsi, le niveau de connaissances acquises en la matière dépasse très largement le cadre de cette brève revue de la littérature. Nous nous contenterons de décrire brièvement les mécanismes de déformations actifs à température ambiante et dans le régime quasi statique.

Si la déformation élastique des matériaux polycristallins à structure C.F.C n'engendre pas de mouvement irréversible d'atomes, car aucun lien inter-atomique n'est rompu dans le régime élastique, il en est tout autre dans le régime plastique. Le comportement plastique résulte de la compétition simultanée de plusieurs mécanismes dont la contribution relative évolue, par exemple, avec la température, le taux de déformation et la structure du matériau. Bien que le régime plastique puisse se décrire graphiquement comme la succession de quatre zones plastiques, chacune étant représentative d'un mécanisme de déformation, il est important de concevoir que tous les mécanismes sont opérationnels dans chaque zone plastique bien que leur contribution puisse être négligeable.

Le glissement des dislocations mobiles et leurs interactions avec les dislocations sessiles et avec les joints de grains, que l'on peut considérer comme une zone à très forte concentration de dislocations géométriquement nécessaires (Zhonghao et al. 1995), est responsable du comportement plastique. Le mécanisme de glissement de dislocations est thermiquement activé, notamment à cause des interactions des boucles de dislocations avec les atomes les environnants. Avant de décrire avec plus de précision les différentes interactions inter dislocations, rappelons brièvement la description typique des mécanismes thermiquement activés.

1. L'activation thermique

On décrit communément les mécanismes thermiquement activés comme le produit d'une probabilité de fluctuations par l'effet moyen qu'à l'événement à l'échelle mesoscopique. On peut donc écrire d'une manière générale (Kocks et al. 1975):

$$\dot{\gamma} = \gamma_0 P_t \qquad (2.1.1)$$

Ici $\dot{\gamma}$ correspond au taux de déformation engendré par l'évènement considéré, γ_0 est la déformation moyenne engendrée par l'événement et P_t est le taux d'activation. Notons que l'événement inverse n'est pas pris en compte dans l'expression (2.1.1).

Le taux d'activation dépend de la fréquence de fluctuation, que l'on peut se représenter d'une manière simple dans le cas du glissement d'une dislocation comme la fréquence à laquelle une dislocation 'tente' de franchir un obstacle, et de la probabilité que l'énergie de l'une de ces fluctuations dépasse un seuil critique. La fréquence de fluctuation peut s'évaluer par deux approches différentes; l'approche cinétique et l'approche statistique (Kocks et al. 1975). Dans la première, on suppose connue la coordonnée de réaction et on évalue les chemins de réactions possibles, alors que dans la seconde on considère tous les chemins de réaction et on évalue la coordonnée de réaction. Si l'on adopte une distribution de Boltzmann pour la description de la probabilité d'obtenir une énergie de fluctuation supérieure à une valeur donnée de ΔG, l'enthalpie d'activation, à température donnée, on obtient alors une loi d'Arrhenius s'écrivant comme suit :

$$p = \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT}\right) \qquad (2.1.2)$$

‘ p ’ représente la probabilité de succès, ‘ ΔG ’ est l’enthalpie d’activation, ‘ k ’est la constante de Boltzmann et ‘ T ’ correspond à la température. On remarque ainsi qu’à enthalpie constante, la probabilité de succès augmente avec la température.

Prenons l’exemple du glissement d’une dislocation, un schéma d’un diagramme de résistance au glissement est présenté dans la Figure II-1. L’axe des abscisses représente la distance parcourue par la dislocation et, l’axe des ordonnées représente le produit de la contrainte appliquée sur une dislocation par le vecteur de Burger. La courbe représente ainsi l’état de contrainte que subit une dislocation lors de son mouvement. Ce dernier est du, entres autres, aux forces de Nabarro Peierls exercées par les atomes environnant la dislocation. Le glissement de la dislocation est favorable si cette dernière passe d’une position stable, que l’on note ‘a’ dans la Figure II-1, à une configuration instable avec énergie motrice positive, notée ‘b’. Lorsque cette configuration est atteinte, la dislocation continue son mouvement même sans apport d’énergie.

Détaillons désormais la signification de l’enthalpie libre d’activation. Si l’on impose une contrainte constante τ à la dislocation, lorsque cette dernière se déplace de ‘a’ jusqu’à ‘b’ on lui a fourni un travail ΔW , si la contrainte appliquée est inférieure à la contrainte maximale sur le diagramme de résistance, la dislocation ne peut alors se mouvoir sans apport d’énergie. Cet apport d’énergie se produit par fluctuations thermiques et représente l’enthalpie d’activation ΔG . Notons ici, comme l’ont fait remarquer Kocks et Ashby (Kocks et al. 1975), que cette nomenclature ne correspond à celle utilisée classiquement en thermodynamique que lorsque aucun autre terme de travail n’est présent.

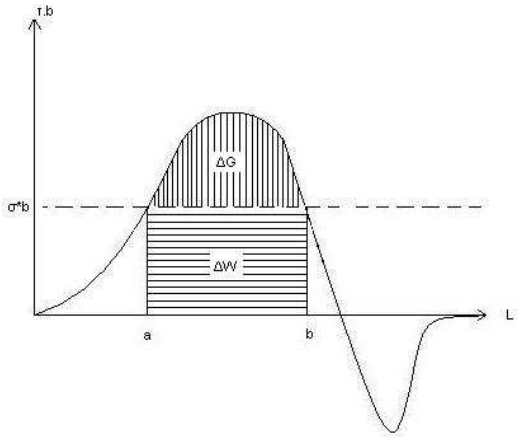


Figure II-1: Schéma du diagramme de résistance au glissement de dislocations

Il n’est pas toujours possible d’évaluer l’enthalpie d’activation, on a souvent recours à des lois empiriques de la forme suivante :

$$\Delta G \approx F_0 \left(1 - \left(\frac{\sigma}{\hat{\sigma}} \right)^r \right)^l \qquad (2.1.3)$$

Ici, F_0 représente l'énergie libre de Helmholtz, c'est donc l'énergie qu'il faut fournir à la dislocation pour avoir glissement à zéro Kelvin. $\hat{\sigma}$ est la contrainte maximale sur le diagramme de résistance au glissement des dislocations. Les paramètres 'r' et 'l' décrivent la 'forme' du diagramme de résistance. On les obtient typiquement grâce à des raisonnements cinématiques. De plus, les conditions suivantes sont imposées sur 'r' et 'l' :

$$0<r<1 \quad \text{et} \quad 1<l<2 \qquad (2.1.4)$$

Dans le cas du glissement des dislocations, une expression simplifiée, exprimée sous la forme d'une loi puissance, est souvent préférée à la forme exponentielle (Kocks 1976; Estrin et al. 1984; Estrin 1998; Kocks et al. 2003). Cependant, dans la plupart des cas, le maximum de la contrainte de résistance au mouvement de dislocations dépend de la densité de dislocations immobiles. Cette contrainte peut être considérée comme la limite d'écoulement à zéro Kelvin et est donnée par la relation suivante (Taylor 1934):

$$\hat{\sigma} = \alpha b M G \sqrt{\rho} \qquad (2.1.5)$$

Ici, b est le vecteur de Burger, M le facteur de Taylor, G le module de cisaillement et ρ représente la densité de dislocations immobiles (ou stockées). Notons que cette relation n'est valable que lorsque l'on considère uniquement l'effet des interactions inter dislocations. Notons aussi que les développements les plus raffinés font la différence entre dislocations géométriquement nécessaires et dislocations stockées statistiquement (Ashby 1970) ainsi qu'entre leurs composantes vis et coin (Cheong et al. 2004). Que l'on décrive l'écrouissage à l'aide de modèles basés sur la plasticité cristalline, où chaque système de glissement est considéré, ou que l'on choisisse une approche moins raffinée, c'est l'évolution de la densité de dislocation avec le temps ou avec l'état de déformation qui gouverne le comportement du matériau (dans le cadre d'étude précisé ci-dessus).

L'évolution de la densité de dislocation avec la déformation peut être considérée comme résultant de l'évolution de la contribution relative de deux phénomènes antagonistes : (1) le stockage de dislocation et (2) l'annihilation de dislocations stockées. Ces deux mécanismes sont présentés dans la suite de cette section.

2. Le stockage des dislocations

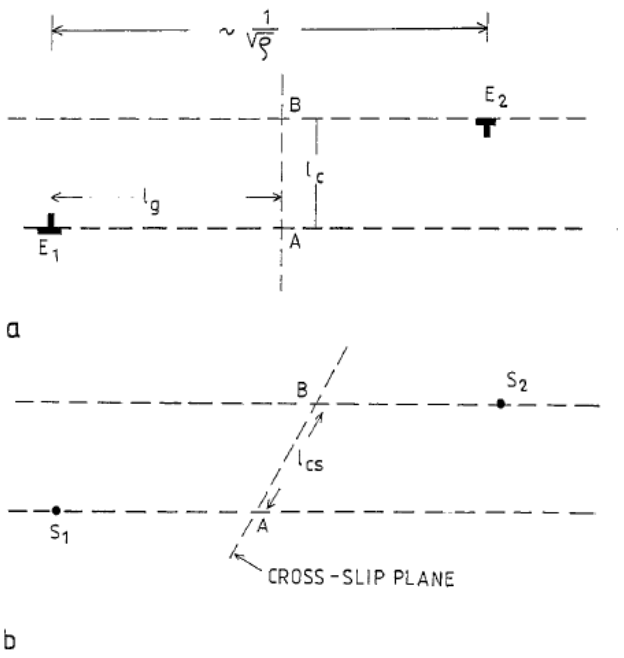
Typiquement, on traite le stockage de dislocations d'une manière statistique. Expérimentalement, mis à part la dépendance des constantes élastiques avec la température, le stockage des dislocations n'est pas influencé par cette dernière. On en conclue que le mécanisme n'est pas thermiquement activé. On considère alors que le stockage de dislocations entraîne une diminution du libre parcours moyen des dislocations mobiles, générant ainsi l'écrouissage.

Les dislocations mobiles s'immobilisent à l'encontre d'obstacles tels que les dislocations stockées et les joints de grains, qui jouent ici un rôle passif de phase dure et agissent comme barrière au mouvement des dislocations. Avec l'augmentation de la densité de dislocations sessiles et la relation (2.1.5), on obtient l'écrouissage du matériau. Le lien entre la densité de dislocations stockées et le libre parcours moyen des dislocations mobiles est obtenu par l'utilisation du concept de similitude introduit par Kuhlman-Wilsdorf (Kuhlman-Wilsdorf 1962).

Notons que les approches « simples » ne différencient pas le type de dislocations (e.g. statistiquement stockées, géométriquement nécessaires…), telles que l'approche de Kocks et Mecking (Kocks 1976; Mecking et al. 1981), ainsi que leurs nombreuses évolutions (Estrin et al. 1984; Estrin 1998; Kim et al. 2001; Kocks et al. 2003) ne permettent pas de prédire la loi de Hall et Petch. Les approches basées sur le gradient de déformation due aux dislocations géométriquement nécessaires peuvent quant à elles prédire la loi de Hall et Petch. De plus, toutes les approches prédisent des libres parcours moyens 10 à 30 fois supérieurs aux mesures expérimentales.

3. L'annihilation des dislocations

Bien que découvert il y a plus de 50 ans avec les travaux de Stokes et Cottrel (Stokes et al. 1954), un consensus n'a pas encore été trouvé quant à l'expression de l'adoucissement dynamique (Nes 1997). L'annihilation de dislocations stockées est thermiquement activée et se produit localement au niveau de sites de recouvrement, lorsque des dislocations à caractère vis ou coin de signes opposés se rencontrent (voir Figure II-2).



Extrait de Nes 1997

Figure II-2: Schéma de l'annihilation de dislocations, cas a) par glissement et monté de dislocation coin, cas b) par déviation de dislocations de type vis

Les modèles décrivant le recouvrage dynamique sont nombreux et sujets à débat portant notamment sur le mécanisme contrôlant l'annihilation de dislocations. Dans son modèle de l'annihilation de dislocations, Nes propose de prendre en compte le «saut» thermiquement activée des segments vis des dislocations (Nes 1997), alors que Kocks et Mecking proposent un modèle basé sur le réarrangement des dislocations immobiles (Kocks et al. 2003). Notons que ces derniers auteurs ont proposé auparavant de nombreuses modélisations du phénomène de recouvrage dynamique où la montée des dislocation était alors considérée comme le mécanisme contrôlant le taux d'annihilation (Kocks et al. 1975; Kocks 1976).

B. Les matériaux nanocristallins

Dans la suite de ce chapitre, la nomenclature définie par Kumar et al. sera utilisée (Kumar et al. 2003). Ainsi, on référera aux matériaux polycristallins ayant des tailles de grains variant de 1 micron à 100 nm comme ayant des tailles de grains ultra fines (UF), et aux polycristaux ayant des tailles de grains inférieures à 100 nm comme étant nanocristallins (NC).

Dans les régimes UF et NC, la diminution de la taille de grains entraîne une augmentation de la fraction volumique de joints de grain et de lignes triples. Comme précisé dans l'introduction générale, le comportement anormal des matériaux NC ne peut être attribué qu'à un changement de structure des joints de grains. Il apparaît donc raisonnable de supposer que dans le domaine NC, la contribution relative du mécanisme de glissement des dislocations, qui comme rappelé dans la section précédente domine le comportement des matériaux conventionnels, diminue au bénéfice d'un autre mécanisme de déformation. Ce dernier n'a pas encore été identifié bien que de nombreux modèles ait été développé pour décrire la chute de la loi de Hall et Petch et plus généralement le comportement en plasticité des matériaux NC. Parmi les hypothèses formulées figure l'activation de phénomènes de diffusion, typiquement actifs à haute température dans le cas de comportements superplastiques, les mouvements de corps solides des grains (e.g. rotation, glissement) et le changement de l'activité des joints de grains. Si ces derniers ont un rôle passif dans les matériaux conventionnels, ils pourraient, dans les domaines UF et NC, contribuer activement à la déformation plastique notamment en émettant des dislocations dans les cœurs de grains.

Cette section traite des procédés de fabrication des nanomatériaux, de la microstructure des matériaux NC et UF. Nous nous attacherons à décrire les modélisations des joints de grains puis nous présenterons une revue des différents travaux expérimentaux, numériques et théoriques traitant des matériaux NC et UF. Enfin, les mécanismes de déformation suspectés d'avoir un effet sur le comportement plastique sont présentés.

1. Procédés de fabrication

Suivant le procédé de fabrication, l'échantillon présentera un comportement fortement différent, lié aux types et quantité de défauts initialement présent dans la microstructure (e.g., impuretés, lacunes, cohérence des interfaces, distribution de la taille des grains). Par exemple, les échantillons fabriqués par dévitrification d'un verre métallique amorphe, procédé ne permettant de fabriquer qu'un nombre restreint d'alliages (d ~10 nm) par des recuits à des températures supérieures à la température de transition vitreuse

(Köster et al. 1991), peuvent présenter des paquets amorphes localisés dans les lignes triples et joints de grains, ce n'est donc plus un procédé de fabrication préférentiellement utilisé.

De même, les échantillons produits par électrodéposition contiennent typiquement des impuretés telles que la présence d'atomes de carbone et d'oxygène et la présence de soufre (Nieh et al. 2005), ce dernier étant un facteur limitant la ductilité du matériau. De plus, les échantillons électrodéposés ont une texture fortement prononcée et la présence de macles est très souvent observée dans ces matériaux (Kumar et al. 2003), alors que les matériaux produits par broyage puis compaction n'exhibent pas de texture mais sont sujets à des problèmes de porosité et de dispersion de la taille de grain (Cheng et al. 2005). Le niveau d'ordre atomique dans les joints de grains dépend aussi du procédé de fabrication. Il apparaît donc critique de faire un choix éduqué du procédé de fabrication en fonction des propriétés désirées du matériau. Les cinq méthodes de fabrication d'échantillons UF et NC suivantes sont les plus utilisées:

- L'électrodéposition (Dalla Torre et al. 2002).
- La condensation à partir d'un gaz inerte (Sanders et al. 1997).
- Le broyage à boulets (de l'anglais ball milling) (Khan et al. 2000).
- La forte déformation plastique (Wang et al. 2003).
- La cristallisation à partir d'un verre métallique amorphe (Lu et al. 1993).

Considérant les très larges différences microstructurelles qui peuvent exister entre deux échantillons fabriqués avec des procédés différents, on s'attend alors à obtenir des réponses largement dispersées. Sanders et al. rapportent une limite d'élasticité de 365 MPa. et une déformation maximale à la rupture de 3% sur un échantillon de cuivre de taille de grain 26 nm produit par condensation d'un gaz inerte (Sanders et al. 1997). Les essais de traction sur un échantillon de cuivre de taille de grain 30 nm produit par le procédé SMAT (« surface mechanical attrition treatment »), proche du procédé de broyage à boulet et compaction, rapportent une limite d'élasticité quasiment double de 760MPa. et une faible ductilité de 3%, alors que l'échantillon de cuivre de taille de grain 62 nm produit par broyage et compaction a une limite d'élasticité de 688 MPa. et une ductilité relativement haute de 12% (Cheng et al. 2005).

Au vu des quelques résultats expérimentaux présentés ci-dessus, il s'avère aisé de juger de la difficulté de validation des modèles théoriques. Cependant, avec les progrès accomplis ces dernières années, la qualité des matériaux est meilleure, notamment en terme de densité, ce qui nous permet de tirer quelques conclusions qui seront présentées à la fin de cette section. Présentons désormais les méthodes de fabrications les plus employées.

a) *Condensation* par gaz inertes (CGI)

La condensation par gaz inerte est un procédé simple par lequel on produit des particules de taille nanométrique. La création de particules s'effectue par condensation des atomes du matériau source alors à l'état gazeux sur un doigt froid (de l'anglais « cold finger ») refroidit par nitrogène liquide. Le doigt froid est équipé d'un racleur permettant de récupérer les particules avant de la compacter sous forte pression dans une chambre à vide à atmosphère d'Argon ou d'Hélium (Hahn et al. 1989).

Le matériau source peut être transformé à l'état gazeux par deux procédés : l'évaporation par chauffage par effet joule ou la pulvérisation par décharge magnétron (Hahn et al. 1989). Cette dernière est déjà couramment utilisée pour la fabrication de films fins. Le procédé par effet Joule fut le premier développé, mais n'est désormais quasiment plus utilisé car il souffre de nombreuses limitations telles que le manque de reproductibilité du à l'hétérogénéité de la distribution de la température du métal fondu. De plus, le procédé de pulvérisation permet de produire un plus grand nombre d'alliages différents avec une meilleure reproductibilité, qui émane du contrôle de l'évaporation par le courant du plasma, ce qui induit qu'en règle générale les échantillons sont moins contaminés. La qualité des particules est très largement influencée par la distance entre le magnétron et le doigt froid, la pression dans la chambre à vide et le courant du plasma (Haas et al. 1992). Notons que ce procédé de fabrication présente l'inconvénient d'être relativement lent. En effet, on ne produit généralement que 100 mg de particules en environ 2000 secondes.

Les travaux expérimentaux de Haas et Birringer ont révélé que le processus de condensation des particules ne dépend pas de la méthode d'évaporation utilisée (Haas et al. 1992). Les répartitions de la taille de grain semblent suggérer que le modèle de Grandqvist et Buhrman, où la croissance des particules se produit par coalescence, puisse être approprié pour décrire la formation des particules (Granqvist et al. 1976).

Bien que ce procédé permette de produire des polycristaux ayant des tailles de grain très petites (~5 nm), le contrôle de la taille de grain n'est pas parfait. En, effet, on observe une distribution log- normal de la taille de grains (Haas et al. 1992). De plus, la présence de pores et de fissures, due à l'étape de compaction, n'est pas négligeable dans les matériaux produits par CGI. Ainsi, les matériaux NC affichent le plus souvent une densité faible variant de 82 à 96% (Nieman et al. 1989) bien que les matériaux les plus récents affichent des densité nettement plus haute.

b) Broyage à boulets

Le procédé de broyage à boulets permet lui aussi de produire des poudres constituées de nanoparticules (Khan et al. 2000). Ce procédé présente l'avantage d'être beaucoup plus rapide que la CGI. La taille de grain obtenue et le temps de fabrication dépendent de nombreux paramètres tels que le type de broyeur, le nombre et la taille des boulets, la fréquence de rotation du broyeur et la quantité de poudre

initiale. A partir de cristaux de tailles variant entre 50 et 100 microns, on peut alors obtenir des nanograins de taille minimum comprise entre 2 et 20 nm. Dans le cas des matériaux C.F.C. la taille des nanograins ne peut être réduite à l'infini. En effet, comme le montrent les travaux expérimentaux de Khan et al., on atteint une saturation de la taille de grain minimale à partir d'un temps limite de broyage. Pour éviter le soudage autogène des cristaux, il est courant d'ajouter de faibles quantités d'acide stéarique (<2%) lors du broyage des cristaux.

L'échantillon est le plus souvent produit par compaction à froid dans une atmosphère d'Argon suivi d'un trempage à chaud. La température de la trempe et le temps de trempage sont des paramètres importants qui permettent de contrôler la taille de grain. Il est extrêmement délicat d'obtenir un matériau dense à une taille de grain désirée car le matériau compacté n'est pas stable en température et les grains ont tendance à croître.

Les travaux de Huang (Huang et al. 1995) ont révélé que la distribution de la taille de grains est très large. De plus, la présence de macles est souvent observée dans la structure initiale des cœurs de grains (Huang et al. 1995). Les joints de grains sont le plus souvent bien ordonnés bien que l'on observe occasionnellement des joints de grain à faibles angles d'inclinaison. Ici encore l'étape de compaction engendre souvent des microfissures au niveau des joints de grains et lignes triples.

Notons que de nouveaux procédés de compaction par soudage à froid (cryo-compaction) permettent d'obtenir des échantillons où la présence de pores est relativement faible et la distribution de la taille de grain est plus fine (Youssef et al. 2004). Ces échantillons présentent une ductilité beaucoup plus haute que tout autres échantillons. De plus, comme le montrent les travaux expérimentaux de Cheng et al., lorsque le matériau subit un laminage à froid, la ductilité peut être encore améliorée (Cheng et al. 2005). Enfin, ce procédé permet de créer des échantillons où la déformation initiale du réseau cristallin est fortement réduite (environ 0.1%).

c) Forte déformation plastique

Les procédés de fabrication basés sur la forte déformation plastique permettent de produire directement des échantillons polycristallins ayant des tailles de grain UF voir même NC. Ces procédés ont l'avantage de créer des matériaux de grande pureté (>99%) et densité. De plus, la mise en oeuvre de ces procédés de fabrication est relativement simple car ils ne nécessitent pas d'étape de consolidation. Il existe trois techniques de fabrication différentes :

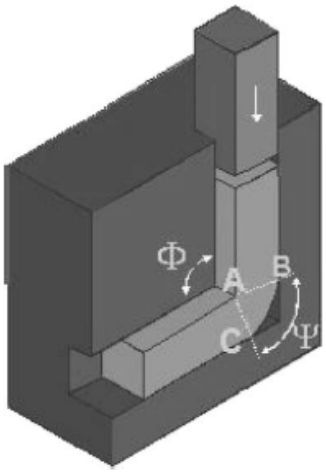
- le procédé ECAP (« equal channel angular pressing »)
- le procédé HPT (« high pressure torsion »)

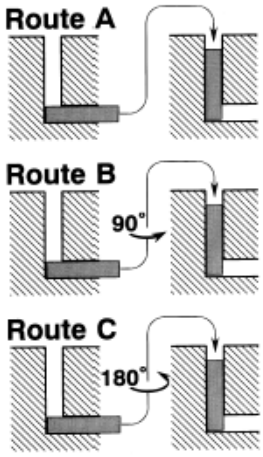
- le procédé CCDC (« cyclic channel die compression »)

Nous ne présenterons que les deux méthodes de fabrication par forte déformation plastique les plus utilisées que sont L'ECAP et le HPT.

(1) ECAP

La méthode ECAP, introduite par Segal et al.(Segal et al. 1981), est désormais la plus utilisée. Elle consiste à extruder une pièce dans un moule métallique comprenant deux canaux de dimensions égales et formant un angle non nul. En répétant l'opération d'extrusion, on modifie la structure du matériau, en particulier la taille de grains du polycristal.





a) Extrait de (Kim et al. 2001) **b) Extrait de (Iwahashi et al. 1997)**

Figure II-3: Schéma a) du procédé ECAP, b) des différentes routes de fabrication

Généralement, ce procédé ne permet pas de produire des matériaux ayant des tailles de grains inférieures à ~100 nm (Furukawa et al. 1996). C'est là d'ailleurs la principale limitation de cette méthode. La structure du matériau obtenu dépend de l'angle formé par les canaux et de la route choisie pour les passes. On définit la route de fabrication par le pivotement de l'échantillon à 0, 90 ou 180 degré entre deux passes consécutives.

Les effets du nombre de passes, de la route et de l'angle formé par les canaux ont été le sujet de nombreuses études. On remarque alors que suite à la première passe, le matériau subit une très forte

réduction de la taille de ses cristaux. Les grains adoptent alors une forme laminaire et globalement le matériau a texture très prononcée (Iwahashi et al. 1997). En répétant l'opération d'extrusion, la taille de grain finale diminue quasiment indépendamment de la route choisie. Cependant, les travaux expérimentaux de Iwahashi et al. ont démontré qu'un nombre de passes plus important est requis pour obtenir un matériau avec le moins de texture possible dans le cas où l'échantillon n'est pas pivoté entre deux passes consécutives. Les observations de Vinogradov et al. ont démontré que la route d'extrusion n'a qu'une influence minimale sur la contrainte à la rupture (Vinogradov et al. 2005), alors qu'elle a une forte influence sur le comportement en fatigue cyclique.

Il fut aussi démontré que l'angle formé par les canaux influence directement la taille de grain minimale atteignable. Lorsque les canaux forment un angle droit, la taille de grains est la plus fortement réduite après chaque extrusion (Nakashima et al. 1998). Enfin, la température d'extrusion conditionne la taille de grain obtenu après chaque passe ainsi que la structure des joints de grains (Yamashita et al. 2000). En effet, une augmentation de la température d'extrusion diminue la réduction de la taille de grains. De plus, l'angle d'inclinaison entre les cristaux est réduit avec une augmentation de température alors qu'à température ambiante les joints de grains forment majoritairement de larges angles (Iwahashi et al. 1997). Les observations des figures de diffractions de rayons X de Zhang et al. (Zhang et al. 1997) démontrent aussi que le réseau cristallin obtenu (avec une taille de grain moyenne d'environ 150 nm) connaît des différences notables en comparaison au réseau des matériaux polycristallins conventionnels en terme de densité de dislocations, qui est nettement plus élevé dans le matériau UF, et de microdéformations (Zhang et al. 1997).

(2) HPT

Le procédé HPT consiste à fixer un disque du matériau désiré dans des butées et à le soumettre simultanément à de très fortes pressions, par le biais d'un poussoir, de l'ordre de plusieurs GPa. et à des fortes déformations en torsion (Zhilyaev et al. 2001). Ce procédé permet de réduire considérablement la taille de grain des polycristaux. La taille de grain minimale, qui dépend évidemment du matériau considéré, est de l'ordre de ~100 nm. Ce procédé est plus performant que l'ECAP dans le sens où à partir d'un même matériau, on atteint le plus souvent un plus grand raffinement de la structure par le procédé HPT. Par exemple, à partir d'un alliage Al-3% Mg, le procédé ECAP permet d'atteindre une taille de grain minimale de ~270 nm (Iwahashi et al. 1998), alors que le procédé HPT permet de réduire la taille de grain jusqu'à ~90 nm (Horita et al. 1996).

Des observations au MEC et des mesures de microdureté sur des échantillons de Nickel ont révélé que le matériau est d'autant plus homogène que la pression appliquée est élevée. De même, on améliore fortement l'homogénéité du matériau en augmentant le nombre de rotations, et donc la déformation, que

subit le matériau. Notons que la dureté du matériau est plus élevée à la périphérie du disque (Sakai et al. 2005) bien que cette différence s'atténue avec une augmentation de la déformation et de la pression imposées . Deux hypothèses s'imposent quant à l'explication de la différence de dureté mesurée expérimentalement entre la zone intérieure du disque échantillon et sa zone périphérique : (1) le matériau est plus écroui dans la région périphérique et (2) la taille de grains des polycristaux est plus fine à la périphérie. Des observations MEC et XRD (diffraction des rayons X) ont confirmé ces deux hypothèses.

De plus, il faut aussi noter que la concentration de joints de grains à faible degré d'inclinaison est plus élevée dans les échantillons UF (Sakai et al. 2005; Yang et al. 2005). Les travaux de Zhilyaev et al. ont montré qu'après déformation, les joints de grain de type $\Sigma 1, \Sigma 3, \Sigma 5-30$ (notation CSL de l'anglais « coincident site lattice ») représentent respectivement environ 18,2% ,~3% et 13.5% des joints de grain du matériau (Zhilyaev et al. 2003). Ceci suggère donc que la distribution des joints de grains ne peut être qualifiée d'aléatoire. Au cas échéant, la proportion des joints de grains à faible CSL serait largement moindre. Enfin, la taille moyenne des grains diminue avec une augmentation de la pression appliquée et augmente avec une augmentation de la température (Hebesberger et al. 2005).

d) Electrodéposition

L'électrodéposition est une technique utilisée dans de nombreux domaines, notamment dans le secteur automobile où de fines couches de chrome sont électrodéposées sur des pièces métalliques afin d'améliorer leur résistance à la corrosion. Ce procédé consiste à plonger une anode (constituée du métal à déposer) et une cathode dans un bain électrolytique, contenant des ions de métal à déposer, et à soumettre l'anode et la cathode à un courant. Par une simple réaction d'oxydation de l'anode on dépose ainsi les atomes de métal de l'anode sur la cathode (substrat). La nouveauté réside dans le fait que ce procédé permet aussi de produire des matériaux NC à très petite taille de grain, le plus souvent de l'ordre de ~20 nm à un taux de déposition relativement rapide, de l'ordre de ~100 microns par heure (Cheung et al. 1995).

On contrôle la taille de grain en ajustant les paramètres expérimentaux (e.g. composition du bain, pH, température, intensité du courant) de sorte que l'on favorise la création de nouveaux grains plutôt que la croissance de grains existant (Erb 1995). Par exemple, les travaux de Ebrahimi et al. sur l'effet du pH sur la taille de grains de Ni NC, ont révélé que la taille des cristaux diminue avec une augmentation du pH (Ebrahimi et al. 1999). Le substrat influence aussi la taille de grain, par exemple, un échantillon de Ni déposé sur un substrat de Cu laminé à froid sera constitué de cristaux de plus grande taille que celle des cristaux de Nickel déposés sur un substrat de Cu recuit (Ebrahimi et al. 2003).

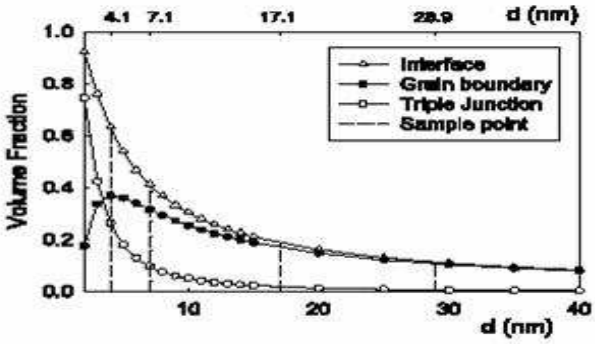
Typiquement la distribution de la taille des cristaux est relativement fine et le matériau déposé a une forte texture ((100) dans le cas du Nickel) (Cheung et al. 1995). Cette dernière tend à s'atténuer avec la

diminution de la taille de grain bien qu'elle reste tout de même marquée lorsque les cristaux sont de très petite taille (Ebrahimi et al. 1999). Il en est de même de la structure columnaire des cristaux. Expérimentalement, les joints de grains ne présentent pas de différence majeure avec ceux que l'on observe dans les matériaux conventionnels. Les matériaux produits par électrodéposition souffrent le plus souvent d'une pureté moindre due à la présence d'atomes d'oxygène et de soufre dans les joints de grains, ce qui nuit au comportement ductile du matériau.

Enfin, les échantillons obtenus présentent des différences majeures avec leurs équivalents préparés par des méthodes de consolidation (Erb et al. 1997). Par exemple, les matériaux électrodéposés ne présentent pas de changement notable du module d'Young par rapport aux matériaux conventionnels alors que dans le cas des matériaux préparés par consolidation, le module d'Young peut être réduit de 80% dans les cas les plus extrêmes. Les mesures de dureté ne diffèrent que très peu suivant le procédé de fabrication (Erb et al. 1997).

2. Structure et observations

Les matériaux polycristallins sont constitués de trois entités ayant des microstructures différentes : (1) les cœurs de grains, (2) les joints de grains et (3) les lignes triples. Ces dernières sont des régions du matériau où trois grains se rencontrent. Bien que l'on parle ici de trois entités différentes, il faut aussi considérer les joints de grains et les lignes triples comme étant des zones d'intersections des cristaux. Par exemple, dans le cas des joints de grain, les atomes les constituants appartiennent encore aux cristaux. Ainsi, la structure des réseaux cristallins des cœurs de grains influencera très largement la structure des joints de grains.



(Zhou et al. 2003)

Figure II-4: Evolution de la fraction volumique de joints de grains et de lignes triples avec la taille de grain.

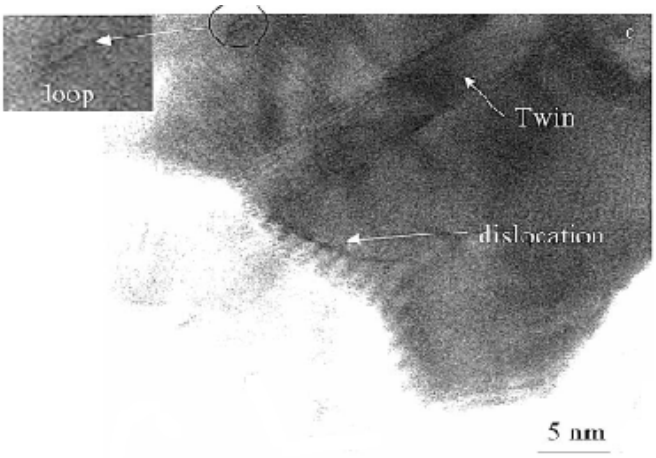
Comme précisé ci-dessus, la fraction volumique de chaque entité évolue avec la taille de grains. En supposant une forme de grains tetracaidecahedrique on obtient l'évolution présentée dans la Figure II-4 (Zhou et al. 2003). On observe alors que la fraction volumique des joints triples ne devient non négligeable que lorsque la taille de grains est inférieure à 10%. Cette dernière augmente continuellement avec une diminution de la taille de grains. Dans le cas des joints de grains, ils ne représentent que 20% du matériau lorsque la taille de grain atteint 40 nm et leur fraction volumique augmente jusqu'à un taille de grains 5 nm où ils représentent ~40 % du matériau. Enfin, la contribution des joints de grains diminue au profit de celle des lignes triples lorsque la taille de grain est inférieure à 5 nm. Il est donc important de noter que bien que la contribution des joints de grains et lignes triples croisse avec une diminution de la taille de grain, les cristaux jouent toujours une part importante dans les domaines UF et NC.

a) Les cristaux

Il n'y a pas d'effet de taille majeur sur la microstructure des cristaux constituant les matériaux NC et UF. Ainsi, le réseau cristallin est pur et s'étend jusqu'aux joints de grains et lignes triples. Par contre, l'activité des dislocations semble diminuer avec la taille de grain jusqu'à ce qu'elle s'éteigne lorsque la taille de grain est inférieure à ~10 nm.

Contrairement aux matériaux conventionnels, on observe souvent la présence de macles dans la structure initiale des cristaux (voir Figure II-5). Comme précisé ci-dessus, la densité de macles est fortement liée au procédé de fabrication (Kumar et al. 2003).

Les observations in situ n'ont pas révélé la présence de débris de dislocations. Ce qui révèle que l'activité des dislocations est complète. On entend par là que chaque dislocation partielle de Schokley est suivie d'une seconde dislocation partielle afin de ne pas créer de défauts d'empilements permanents dans le matériau.



(Kumar et al. 2003)

Figure II-5: Image « STEM » sur échantillons de Nickel NC préparés par électrodéposition

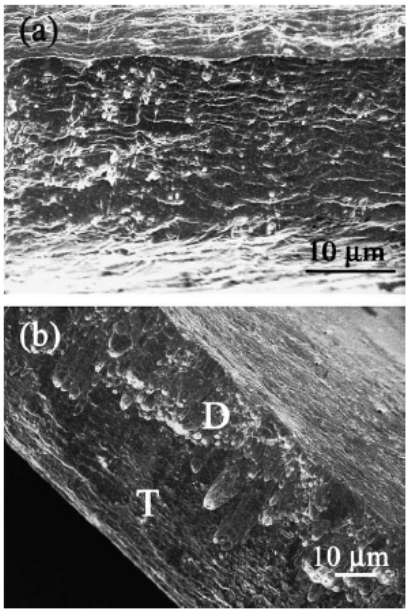
b) Les joints de grains et lignes triples

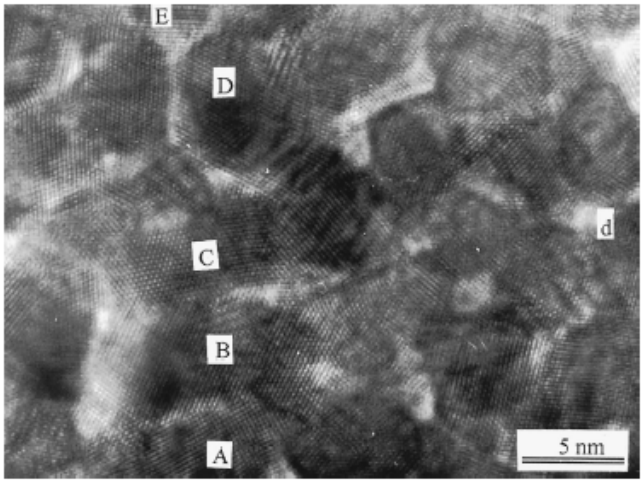
La structure des joints de grains et des lignes triples a pu être caractérisée à l'aide d'observations réalisées par MEC. Comme le révèlent les observations de Ranganathan, les lignes triples ont un caractère très changeant dans le matériau (Ranganathan et al. 2000). Dans la Figure II-6 on observe; une région très désordonnée localisée au niveau d'une ligne triple, notée 'd', un joint de grain parfait entre les cristaux A et B, un joint de grain désordonné entre les cristaux D et E, et un joint de grain à caractère changeant entre les cristaux B et C. Malgré le caractère changeant des joints de grains, on ne peut toutefois considérer ces derniers comme ayant une structure amorphe, ce qui signifierait alors que l'ensemble des joints de grains serait désordonné. Les simulations de DM de l'équipe de Van Swygenhoven et de Spearot et al., réalisées en trois dimensions, ont aussi contribué à réfuter l'idée d'une structure de type gaz dans les joints de grains (Van Swygenhoven et al. 2001; Spearot et al. 2005). Ainsi, une grande partie des joints de grains ont une structure à facettes comme dans le cas des joints de grains des matériaux conventionnels qui peut être décrite par les modèles d'unités structurelles. De plus, au regard de la présentation des procédés de fabrication, la plupart des joints de grains présentent de grands angles d'inclinaison, ce qui est un indice permettant d'identifier les possibles sources de dislocation localisées dans les zones intergranulaires.

Bien qu'aucun travail expérimental n'ait encore permis d'observer l'émission de dislocations par les joints de grains et lignes triples, ce mécanisme a été fortement suggéré par les résultats de nombreuses simulations de DM, 2D columnaires (Yamakov et al. 2001) et 3D (Derlet et al. 2002). De surcroît, les travaux expérimentaux de Kumar et al. sur des échantillons de Ni électrodéposés ayant une taille de grains de 30 nm, suggèrent que les mécanismes d'émission et d'absorption de dislocations par les joints grains soient actifs dans le régime NC (Kumar et al. 2003). Ceci sous entend que les joints de grains ont un rôle

actif, non limité à celui de barrière aux glissement des dislocations, dans le régime NC. Notons encore, que le mécanisme d'émission de dislocations par les joints de grains fut proposé par Li dès 1963, bien avant l'existence de matériaux NC et UF (Li 1963). Enfin, les travaux expérimentaux de Murr et Venkatesh suggèrent aussi que les joints de grain puissent émettre des dislocation dans les cristaux (Murr 1981).

Les défauts telles que les porosités, les atomes étrangers et les nano fissures sont très majoritairement localisés dans les régions intergranulaires. De plus, les échantillons NC sont souvent sujets à la rupture fragile alors que dans les échantillons UF, on observe la présence de ce qui semble être des bandes de glissements dans les faciès de rupture, démontrant qu'une déformation plastique s'est produite (voir Figure II-6). Deux hypothèses s'opposent quant à l'explication de l'occurrence de déformation plastique dans les matériaux NC. La première hypothèse est celle défendue par Kumar et al. et Wang et al. qui imputent le manque de déformation plastique au fait que le glissement et la multiplication des dislocations n'ont pas lieu dans les matériaux NC. Ainsi le comportement plastique ne peut se produire que par le biais de mouvements de corps solide des grains. Si ce mouvement n'est pas accommodé par des phénomènes de diffusion, on observera alors la création de fissures au niveau des joints de grain et lignes triples. La seconde hypothèse repose sur le fait que la présence d'atomes d'impuretés et de fissures initialements présents dans le matériau nuisent au comportement plastique.





c) Extrait de (Ranganathan et al. 2000)

Extrait de (Kumar et al. 2003; Wang et al. 2003)

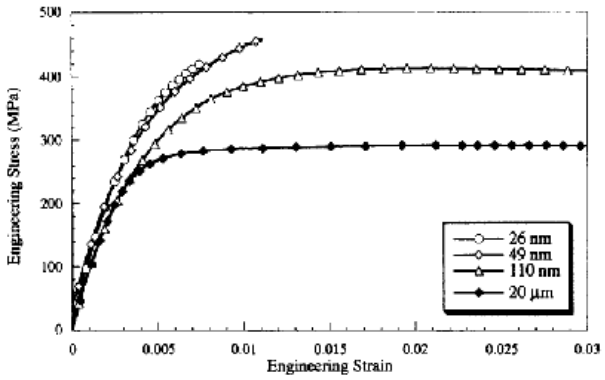
Figure II-6: Micrographie « SEM » du faciès de rupture de Cu NC produit par SMAT, a) et de Cu UF b) et, c) Image MEC d'un film fin de Palladium NC fabriqué par électrodéposition

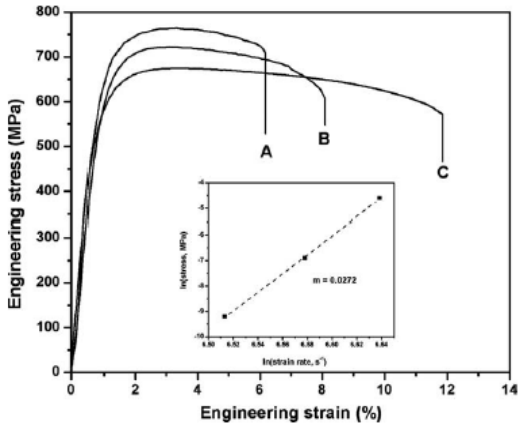
3. Comportement des matériaux NC

Présentons désormais avec plus de détails le comportement des matériaux UF et NC. En conséquence aux différentes microstructures résultantes des différents procédés de fabrication, on peut s'attendre à obtenir des réponses sensiblement différentes du comportement des matériaux. On remarquera par exemple qu'un échantillon produit par broyage à boulets et compaction (Cheng et al. 2005) exhibe une plus forte ductilité qu'un échantillon produit par électrodéposition (voir Figure II-7 et Figure II-8) (Sanders et al. 1997). Remarquons que les résultats expérimentaux de Cheng et al. indiquent qu'il est incontestable que les matériaux purs NC peuvent se déformer plastiquement. Ce sujet était encore propice au débat il y a quelques années. La faible ductilité des échantillons produis par électrodéposition est probablement due aux impureté présentes dans les régions inter cristallines.

Les essais de sauts de taux de déformation réalisés par Cheng et al. ont mis en exergue une caractéristique très intéressante du comportement des matériaux NC. Si l'on décrit l'écrouissage à l'aide d'une loi puissance, le coefficient d'écrouissage, que l'on définira ici comme $m = \partial \ln \dot{\varepsilon} / \partial \ln \sigma$ (où $\dot{\varepsilon}$ est le taux de déformation normal et σ est la contrainte normale), est alors sensible à la taille de grains. Dans le cas des matériaux conventionnels m est de l'ordre de ~230 alors que dans le cas des matériaux NC Cheng et al. reportent une valeur de ~37 (Dans la Figure II-8, la convention pour le coefficient d'écrouissage est inversée). Ceci signifie donc que le volume d'activation du glissement des dislocations connaît une dépendance vis-à-vis de la taille de grain (Wei et al. 2004).

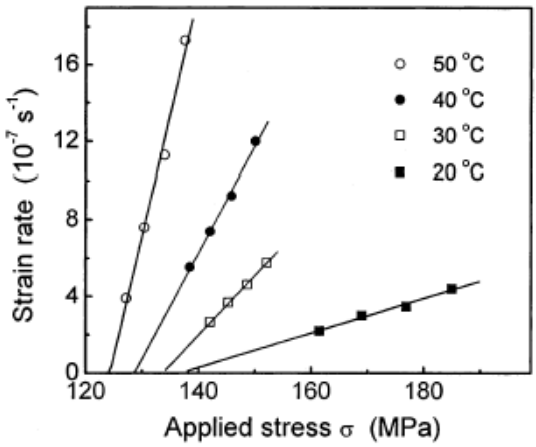
Bien que de nombreux essais de fluages aient été effectués, les différences de comportements reportées sont telles qu'on ne peut pas encore apporter de conclusion quant à la nature du comportement en fluage des matériaux NC. Cai et al. ont effectué des essais de fluages à faibles températures sur des échantillons de Cu électrodéposés ayant des tailles de grains de ~30 nm, les auteurs rapportent des taux de déformation de l'ordre de 1.E-7/s (voir Figure II-9) et concluent, en estimant l'énergie d'activation, que le fluage des matériaux NC est la résultante de la diffusion de lacunes dans les zones intercristallines (fluage de Coble) (Cai et al. 2000). Les travaux de Yin et al. sur des échantillons à faible porosité de Ni électrodéposés sont en accord avec les travaux de Cai et al (Yin et al. 2001). A l'inverse, les expériences de Sanders sur des échantillons de NC Ni produits par CGI des taux de déformation en fluage sensiblement inférieurs à ceux reportés par Cai et al.(Sanders et al. 1997). De plus, Li et al., ont effectué des essais de fluages en compression sur les même échantillons que ceux utilisés par Cai et al. et ont rapporté des taux de déformation semblables aux valeur généralement reportées dans le cas des matériaux conventionnels (Li et al. 2004).





(Sanders et al. 1997) **(Cheng et al. 2005)**

Figure II-7: Essai de traction sur des échantillons de Cu à différente tailles de grains	**Figure II-8: Essai de traction sur NC Cu (d=62 nm) produit par broyage à froid et résultat des essais de sauts de taux de déformation (en encadré)**



(Cai et al. 2000)

Figure II-9: Essai de fluage à faible température sur des échantillons de NC Cu à faible température

4. Discussion:

En résumé, deux approches peuvent être suivies pour fabriquer des échantillons NC et UF: l'approche permettant de produire directement des polycristaux (forte déformations plastiques, électrodéposition), et l'approche nécessitant une étape de compaction (broyage à boulets et condensation

d'un gaz inerte). Les approches nécessitant une étape de compaction mènent les plus souvent à des matériaux de plus faible densité. L'électrodéposition permet de produire des polycristaux raffinés en terme de taille des cristaux, cependant les échantillons souffrent le plus souvent de problèmes de pureté et exhibent une texture prononcée ce qui pourrait avoir une influence sur leur comportement. Les matériaux produits par fortes déformations plastiques ont aussi une texture prononcée mais une plus forte densité et une meilleure pureté. Toutefois, ce procédé engendre une forte densité de dislocations initiales et ne permet que très rarement d'atteindre le domaine NC.

En règle générale, les joints de grains présentent de grands angles d'inclinaison, bien que certains procédés telle que la torsion sous haute pression, engendrent une densité de joints de grains à petit angle d'inclinaison légèrement supérieure. Les impuretés et porosités se logent majoritairement dans les joints de grain et lignes triples. Les cristaux sont le plus souvent purs, mais présentent suivant le procédé de fabrication une orientation préférentielle (fortes déformations plastiques, électrodéposition). On notera de même que la présence de macles dépend du procédé de fabrication.

Bien que les différents procédés de fabrications mènent à des matériaux ayant des microstructures plus ou moins semblables, on peut tout de même remarquer certaines informations communes à chaque méthode :

(1) Indépendamment du procédé de fabrication, la chute de la loi de Hall et Petch est toujours observée. La taille de grain critique dépend du matériaux et se situe entre ~15 et ~30 nm.

(2) Le coefficient d'écrouissage, semble être dépendant de la taille de grains, ce qui a été observé dans des essais de traction sur des échantillons de Ni électrodéposés (Dalla Torre et al. 2002), et sur des échantillons de Cu consolidés (Cheng et al. 2005).

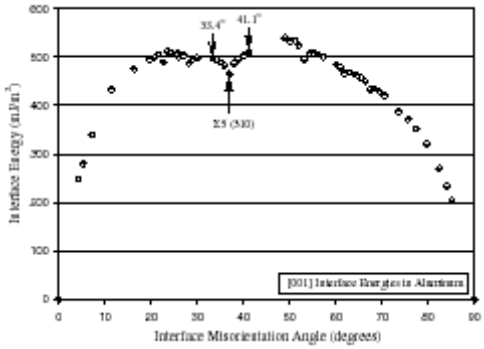
(3) L'activité des dislocations décroît dans le domaine NC jusqu'à disparaître lorsque les cristaux ont des tailles inférieures à ~10 nm (Ke et al. 1995).

(4) Dans les joints de grains, seules les distances inter-atomique dépendent de la taille de grain. (Kumar et al. 2003) Des zones de plus grands désordre atomiques sont le plus souvent observées au niveau des lignes triples (Ranganathan et al. 2000).

C. Modélisation des joints de grains.

Les résultats expérimentaux présentés ci-dessus indiquent que les joints de grains pourraient avoir une influence non négligeable sur le comportement des matériaux UF et NC. Nous présentons ici brièvement les différents types de modèles permettant de décrire les joints grains en terme de géométrie tout comme en terme d'énergie de surface. Ce rappel s'avérera utile dans un chapitre prochain où nous proposerons l'utilisation de la DM pour la description du mécanisme d'émission de dislocations par les joints de grains.

Une interface formée par un bicristal est uniquement définie par 5 degrés de liberté. 3 degrés de liberté sont nécessaires pour décrire l'orientation relative des deux cristaux et, 2 degrés sont nécessaires pour définir de manière unique l'orientation de la surface par rapport aux grains. Comme le montre la Figure II-10, où l'influence d'un unique degré de liberté est étudiée par DM, l'énergie de l'interface dépend directement de ces degrés de libertés. Une interface reliant deux grains ayant des orientations relatives différentes peut être décrite géométriquement à l'aide d'enchaînements particuliers de défauts à une dimension, telles que les dislocations ou les désinclinaisons, assurant la désorientation entre ces deux cristaux. Dans les cas simples dans lesquels le joint de grains peut se décrire en deux dimensions (2-D) où seul l'angle d'inclinaison entre les joints de grain est variable et les autres degrés de liberté sont fixés à zéro, trois types de modèles ont été développés pour décrire l'énergie de l'interface : (1) le modèle basé sur les dislocations, (2) les modèles basés sur les unités structurelles et (3) les modèles basés sur les désinclinaisons. Ces derniers sont une évolution des deux types de modèle précédents.



(Spearot et al. 2005)

Figure II-10: Evolution de l'énergie d'une interface à un degré de liberté en fonction de l'angle de d'inclinaison (réalisé par DM)

1. Modèle basé sur les dislocations.

En 1950, Read et Shockley ont introduit la première approche permettant de décrire l'énergie d'une interface. Comme précisé par les auteurs, l'approche est développée en 2-D. Cependant elle pourrait être étendue dans un cas tridimensionnel.

Les auteurs considèrent que l'énergie d'un joint de grain résulte de la contribution de deux termes. Un premier terme représentant l'énergie du cœur des joints de grains qui est localisée dans la zone fine d'intersection des deux grains, et un second terme représentant l'énergie de déformation élastique autour du cœur du joint de grain. Dans l'hypothèse des petits angles de déformations l'expression de l'énergie du cœur de grain est la même que celle de l'énergie de déformation élastique. Cependant, comme précisé par les auteurs, dans le cas plus général où les angles d'inclinaison peuvent être grands, le calcul de l'énergie du cœur de grain devrait être effectuée à l'échelle atomique. Présentons désormais l'approche de Read et Shockley.

L'interface est décrite par deux axes (l'axe des x et l'axe des y), on évalue les densités de dislocations dans les directions x et y en considérant les plans cristallins comme des lignes de flux. L'énergie de l'interface est évaluée en considérant tout d'abord une unique dislocation 'y' et en calculant les travaux effectués sur son plan de glissement par les dislocations 'x' et 'y'. Bien que chacun des termes de travail soit divergeant, la somme des deux termes donne des valeurs finies. Les termes de travail sont évalués en multipliant une demie fois la constante de réseau par l'intégrale de la contrainte de cisaillement sur le plan de glissement. En supposant l'indépendance de l'énergie générée par les dislocations 'x' sur la dislocation 'y' considérée, avec la position de la dislocation 'y' et le jeu de dislocations 'x', l'énergie de l'interface par unité de longueur est simplement la somme sur les deux types de plans de glissement de l'énergie d'un plan de glissement multiplié par le nombre de plans de glissements (le résultat est vrai aussi dans le cas opposé). Finalement les auteurs obtiennent l'expression suivante de l'énergie de l'interface :

$$E_{él} = E_0 \theta \left(A - \ln \theta \right) \qquad (2.3.1)$$

Où θ définit l'angle d'inclinaison entre les deux cristaux. Les termes E_0 et A sont définits comme suit :

$$E_0 = \frac{Ga}{4\pi\left(1-\nu\right)}\left(\cos\varphi - \sin\varphi\right) \qquad (2.3.2)$$

et

$$A = A_0 - \frac{\sin 2\varphi}{2} - \frac{\sin\varphi \cdot \ln\left(\sin\varphi\right) + \cos\varphi \cdot \ln\left(\cos\varphi\right)}{\sin\varphi + \sin\varphi} \qquad (2.3.3)$$

G, φ, a et ν représentent respectivement le module de cisaillement, l'angle d'orientation du joint de grain, l'inverse de la densité de flux de plans et le coefficient de Poisson. Le terme A_0 est donné par :

$$A_0 = 1\ln\left[\frac{a}{2\pi r_0}\right] \qquad (2.3.4)$$

Ici, r_0 est la borne d'intégration inférieure de la contrainte de cisaillement. Pour être rigoureux la borne inférieure d'intégration devrait correspondre à la distance minimale à laquelle le matériau est déformé élastiquement, notée r_e, et l'énergie à des distances inférieures à r_e devrait être calculée au niveau atomique. Cependant, dans le cas d'interfaces à faible angle de désorientation, où l'énergie de désorientation est indépendante de la distance entre les dislocations, l'expression de l'énergie entre r_0 et r_e est la même qu'à des distances supérieure à r_e.

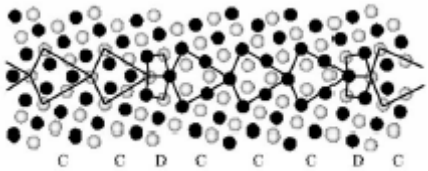
Bien que le modèle de Read et Shockley soit bien adapté au calcul des énergies des interfaces présentant de faibles angles d'inclinaisons, le modèle perd de son pouvoir prédictif dans le cas des grands angles d'inclinaisons, notamment par le fait que l'énergie de cœur de l'interface ne peut plus être approximée à partir de l'énergie de déformation élastique autour du cœur de l'interface mais aussi par le fait que l'interaction des dislocations constituant le joint de grain n'est pas prise en compte (une discussion approfondie du modèle de Read et Shockley pourra être consultée dans le travail de Gleiter (Gleiter 1982)). Pour remédier à cette limitation, les modèles basés sur les unités structurelles ont été développés.

2. Modèle des unités structurelles

Une extension du modèle de Read et Shockley basée sur les unités structurelles, introduites par Sutton et Vitek (Sutton et al. 1980; Sutton et al. 1980; Sutton et al. 1981; Sutton et al. 1982), et sur le modèle de Balluffi (Balluffi et al. 1984) fut proposée par Wang et al. (Gui-Jin Wang et al. 1986).

Présentons tout d'abord le concept d'unités structurelles. Le modèle des unités structurelles est basé sur des simulations de SM et se limite au cas des joints de grains ayant pour seul degré de liberté l'angle d'inclinaison entre les grains (les autres degrés de liberté sont supposé nuls). On suppose que, dans un domaine d'angles d'inclinaisons donné, tout les joints de grains ayant un même plan moyen définissant le joint de grains, sont composés d'une combinaison de deux éléments structurels qui correspondent à une organisation particulière d'atomes (Sutton et al. 1980). Par exemple, on observera dans la Figure II-11 des unités de type C et D. Les deux unités structurelles constituant le joint de grain permettent de définir des joints de grains 'limites' constitués d'un seul type d'unité structurelle. Tout autre joint de grains est composé d'une combinaison des deux unités structurelles avec la condition que la séquence d'unités structurelles la moins présente doit être le plus éloigné possible d'une séquence semblable (Sutton et al. 1981). Par exemple, en utilisant la notation CSL, un joints de grain $\Sigma 11(310)$ n'est composé que d'unités

structurelles de type A, ces dernière ayant été introduites par Sutton et Vitek (Sutton et al. 1980), un joint de grain de type $\Sigma 27$ (115) est composé uniquement d'unités structurelles de type B alors q'un joint de grain de type $\Sigma 89$ (229) est composé de la série BBBA.



(Spearot et al. 2005)

Figure II-11: Joints de grain constitué d'unité structurelle de type C et D (construit numériquement par DM).

Suite aux travaux de Sutton et Vitek, Balluffi et Brokman ont proposé une méthode simple, permettant de déterminer certaines propriétés des cœurs des joints de grains, telle que leur énergie ou leur diffusivité (Balluffi et al. 1984; Balluffi et al. 1984). La conceptualisation de Balluffi et Brokman démontre qu'à l'aide d'un nombre fini de propriétés évaluées à l'échelle moléculaire sur chaque type d'unité structurelle, on peut prédire la propriété de tout joint de grain constitué de ce type d'unité structurelles. Motivés par les travaux de Sutton, Vitek, Balluffi et Brokman, Wang et al. ont développé un modèle puissant applicable aux grands angles d'inclinaison. Ainsi, si E dénote l'énergie du joint de grain, on peut alors écrire cette dernière comme étant la somme de l'énergie due aux champs de déformation élastique du joints de grain, donné par Read et Shockley et notée $E_{él}$, et de l'énergie du cœur des joints de grains E_C. Ainsi on obtient :

$$E = E_{él} + E_C \qquad (2.3.5)$$

L'énergie du cœur du joint de grains est calculée en utilisant le modèle de Baluffi et Brokman. Ainsi, en supposant un joint de grain constitué de m unités structurelles de type α et de n unités structurelles de type β avec m>n, et en tenant compte de l'interaction entre les deux types d'unités structurelles, l'énergie du cœur du joint de grain s'écrit comme suit :

$$E_C = E_C^{\alpha} + d_{\alpha\beta}\left(E_C^{\alpha\beta} - E_C^{\alpha}\right)l \qquad (2.3.6)$$

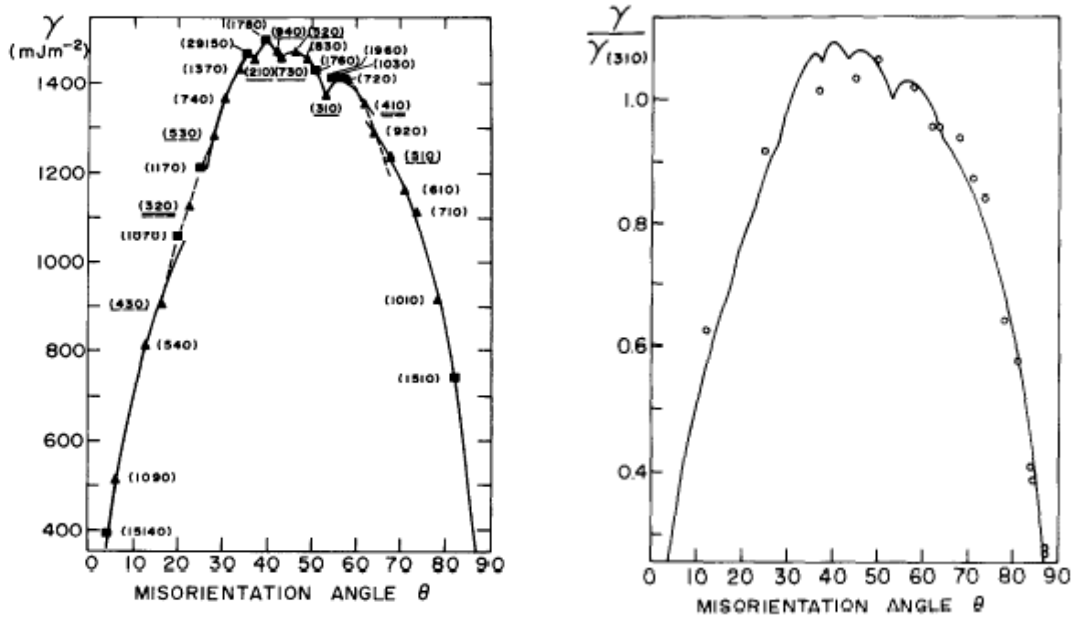
Où $d_{\alpha\beta}$, l, E_C^{α}, $E_C^{\alpha\beta}$ représentent respectivement la longueur d'une séquence $\alpha\beta$, la distance moyenne entre deux dislocations dans le joint de grains, donnée par la formule de Frank, l'énergie d'une séquence $\alpha\alpha$ et

l'énergie d'une séquence $\alpha\beta$. En introduisant la formule de Frank dans (2.3.6) et en combinant le résultat avec (2.3.5), on obtient l'expression de l'énergie totale du joint de grain.

$$E = E_{él} + E_C^{\alpha} + \frac{\Delta\theta}{b} d_{\alpha\beta}\left(E_C^{\alpha\beta} - E_C^{\alpha}\right) \qquad (2.3.7)$$

Notons qu'ici encore l'expression de l'énergie dépend du rayon du cœur du joint de grain. Cette limitation provient logiquement de l'utilisation du modèle de Read et Shockley.

Les prédictions du modèle sont comparées d'une part aux prédictions réalisées par simulations numériques Figure II-12 a), où les triangles correspondent aux points utilisés pour déterminer r_0, et d'autre part aux mesures expérimentales Figure II-12 b). Le modèle de Wang et al. est en accord quasi-parfait avec les simulations numériques. Notamment les chutes (traduit de l'anglais « cusp ») de l'énergie de l'interface, qui correspondent aux cas où la distance inter dislocations n'est pas un multiple entier de la distance interatomique, peuvent être reproduit. Enfin, le modèle prédit des valeurs du rapport de l'énergie de surface ayant pour axe inclinaison l'axe (100) sur celle des interfaces d'axe d'inclinaison (310).très proches des mesures expérimentales.



a) **b)**

Figure II-12: Comparaison des prédictions du modèle de Wang et al. avec les prédictions numériques a), et avec les mesures expérimentales b) (Gui-Jin Wang et al. 1986).

Les modèles basés sur les unités structurelles sont certes plus puissants que la première approche proposée par Read et Shockley mais ils souffrent eux aussi de limitations. Notamment l'intégration de mécanismes tels que l'émission de dislocations par les joints de grains qui sera présentée dans une prochaine section. Aussi, de nouveaux modèles basés sur les unités de désinclinaisons sont apparus (Hurtado et al. 1995).

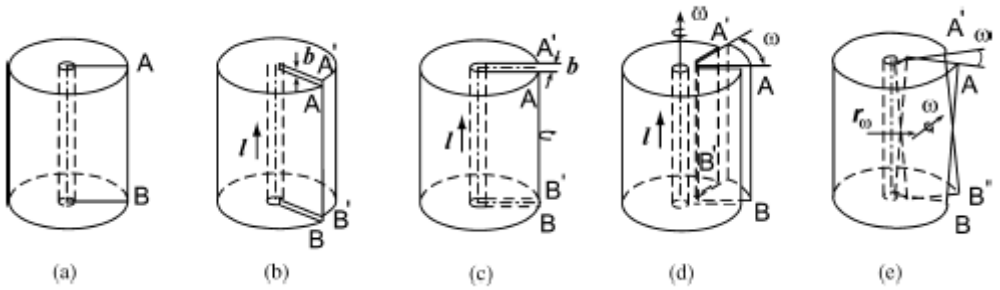
3. Modèle basé sur les désinclinaisons

a) Rappel

Les désinclinaisons sont des défauts linéaires de rotation reliant la surface d'une "entaille" à un milieu continu (Volterra 1907). On suppose que les faces non déformées du volume considéré (on travail sur un cylindre) connaissent un déplacement u dû à une rotation d'angle w autour d'un axe fixe. Pour se représenter plus aisément le concept de désinclinaison, on peut considérer que de la matière est ajoutée ou retirée au niveau de "la coupure" du milieu continu (voir Figure II-13 d) et e)). On parle de désinclinaison positive lorsque la matière est retirée au milieu continu et de désinclinaison négative dans le cas contraire. Comme dans le cas des dislocations, les désinclinaisons génèrent des champs de déformation à longue distance. Si l'on décrit la "force" d'une dislocation par son vecteur de Burger, on décrit une désinclinaison par son vecteur de Frank (noté w). Le déplacement u des faces non déformées est donné par (De Wit 1973):

$$u = w \times (r - r_w) \qquad (2.3.8)$$

Ici, r est le rayon du coeur et r_w est la distance entre l'axe de rotation et l'axe centrale du cylindre de matière considérée. Comme dans le cas des dislocations, où l'on différencie les dislocations vis (Figure II-13 b)) des dislocations coins (Figure II-13 c)), il existe deux types de désinclinaisons : les désinclinaisons cales (wedge) (Figure II-13 d)) et les désinclinaisons «twist» (terminologie anglaise) (Figure II-13 e)).



(Romanov 2003)

Figure II-13: Schéma d'un cylindre de matière, d'une dislocation vis b), d'une dislocation coin c), d'une désinclinaison cale d), d'une désinclinaison twist e)

Toute désinclinaison peut être géométriquement équivalente à un arrangement particulier de dislocations. On peut par exemple se représenter une désinclinaison cale négative comme un mur de dislocations. Cependant, les modèles basés sur les désinclinaisons ne sont équivalents à ceux basés sur les dislocations qu'en termes de champ de contraintes où de déformations. Comme précisé par Li, un mur de désinclinaisons ne peut pas avoir un unique champ de déformation pour un mur de dislocations équivalent donnant le même champ de contraintes (Li 1972).

b) Champ de contraintes associées à une désinclinaison cale.

Dans un souci de simplicité, nous ne présenterons ici que les résultats traitant de des champs de contraintes liés aux désinclinaison cales. Le champ de contraintes associé à une désinclinaison cale est donné par (Huang et al. 1995):

$$\frac{1}{2}\left(\sigma_{xx}+\sigma_{yy}\right)=\frac{Gw}{2\pi(1-\nu)}\frac{1}{2}\left(\ln\frac{R^2}{x^2+y^2}-1\right) \qquad (2.3.9)$$

$$\frac{1}{2}\left(\sigma_{xx}-\sigma_{yy}\right)=\frac{Gw}{2\pi(1-\nu)}\frac{1}{2}\left(\ln\frac{x^2-y^2}{x^2+y^2}\right) \qquad (2.3.10)$$

$$\sigma_{xy}=\frac{Gw}{2\pi(1-\nu)}\frac{xy}{x^2+y^2} \qquad (2.3.11)$$

Où G est le module de cisaillement, w est l'angle de rotation et R est le rayon du cylindre comprenant le désinclinaison de type cale, x et y désignent les coordonnées des points considérés ((0,0) correspond au centre du cylindre de matière incluant la désinclinaison). σ_j, (j=xx,yy,xy) sont les composantes du tenseur des contraintes. L'amplitude du champ de contrainte, σ est donné par:

$$\sigma=\frac{Gw}{4\pi\left(1-\nu\right)}$$

Comme prédit par les équations (2.3.9)-(2.3.11), les désinclinaisons possèdent de très grands champs de contraintes internes et des énergies nettement supérieures à celle d'un cristal parfait. Cependant l'énergie d'ensembles particuliers de désinclinaisons, tels que les dipôles de désinclinaisons, est nettement plus faible (Romanov 2003).

c) Les modèles

Comme le démontrent les deux premier types de modèles présenté ci-dessus, la difficulté majeure dans la modélisation de l'énergie des joints de grain provient du calcul de l'énergie du cœur des joints de grains qui peut être désormais calculée à l'aide de simulations numériques à l'échelle atomique. Le calcul de l'énergie de déformation élastique , $E_{él}$, à l'aide d'une modélisation basée sur les dislocations est lui limité par le fait qu'une distance critique d'intégration, correspondant à la dimension du cœur du joint de grain, doit être introduite. Les modèles basés sur les désinclinaisons permettent de s'affranchir de cette difficulté. Ainsi, Les modéles de Li et Shih et Li déterminent l'énergie élastique de joint de grain à un seul degré de liberté (Li 1972; Shih et al. 1975). Cette dernière est donnée par:

$$E_{él} = \frac{Gw^2 h}{32\pi^3 (1-\nu)} f(\lambda) \qquad (2.3.12)$$

Où G est le module de cisaillement, w est la « force » du joint de grain constitué de dipôles de désinclinaison de type A et B par exemple (Ici les unités de type B sont les plus nombreuses dans le joint de grain). ν est le coefficient de Poisson, h est la période du mur de désinclinaisons et $\lambda = \frac{\pi L_B}{h}$ où L_B est la longueur des segments constitué d'unités B (Les unités les plus présentes dans le joint de grain). La fonction f est donnée par :

$$f(\lambda) = -16\int_0^{\lambda} (\lambda - \upsilon) \ln|2\sin\upsilon| d\upsilon \qquad (2.3.13)$$

Comme le discutent Nazarov et al., les modèles basés sur les désinclinaisons donnent dans tous les cas (e.g. même dans le cas de joints de grains dit « spéciaux ») des valeurs de l'énergie des joints de grains ayant une signification physique (Nazarov et al. 2000). En effet, les modèles basés sur les unités structurelles de dislocations peuvent dans certains cas prédire des valeurs négatives de l'énergie élastique des joints de grains ce qui n'a pas de signification physique. De surcroît, comme nous l'avons précisé auparavant, les modèles basés sur les unités structurelles de désinclinaisons sont beaucoup plus performants dans le cas de joints de grains présentant de larges angles d'inclinaison. De nombreuses évolutions du modèle de Shih et al. ont été proposées. On pourra se reporter aux travaux de Hurtado et al, incluant les effets du mécanisme

d'émission de dislocations sur l' énergie des joints de grains et aux travaux de Mikaleyan décrivant l'énergie des joints de grain de longueur fini (Hurtado et al. 1995; Mikaelyan et al. 2000).

D.Mécanismes de déformation

Dans cette section, nous présentons les différents mécanismes de déformation supposés actifs dans les domaine UF et NC. Nous discutons des mécanismes de fluage de Coble, de Nabarro Herring, de glissement des joints de grains, d'émission des dislocations par les joints de grains. Enfin, nous conclurons cette section par une discussion traitant de l'effet de taille dans l'activité des dislocations dans les cœurs de grains.

1. Lien avec la superplasticité

Comme précisé dans la section dédiée au comportement des matériaux UF et NC, de nombreux travaux expérimentaux et théoriques suggèrent que certains mécanismes opérant typiquement dans le dans le cas de comportements en fluage, tel que le glissement des joints de grains, puissent engendrer l'adoucissement du comportement en plasticité en traction/compression uni axiale et en fluage des matériaux NC. Par exemple, Yin et al. ont rapporté des taux de déformation en fluage de l'ordre de 11.E-10/s, à des températures comprises entre 290 et 373 Kelvin, suggérant que le mécanisme de fluage de Coble puisse être actif à température ambiante (Yin et al. 2001). Il pourrait donc exister un lien intéressant, nécessitant le développements de modèles adaptés (Chapitre 3), entre des mécanismes menant le plus souvent à des comportements superplastiques et les matériaux UF et NC. Cependant, il est très délicat de justifier ce lien avec la superplasticité à l'aide d'un raisonnement physique rigoureux.

Typiquement, dans le cas de comportements en fluage, les mécanismes basés sur la diffusion de lacune, et ceux basés sur le mouvement de corps solide des grains sont actifs sous des conditions de déformations et de température sensiblement différentes à celles où soumises aux matériaux NC. Dans le cas des matériaux conventionnels, une carte de déformation représentant les domaines où chaque mécanisme est actif et dominant a pu être établie. Ces domaines sont fonctions de la contrainte de cisaillement normalisée et de la température normalisée par rapport à la température de fusion (voir Figure II-14). On remarquera par exemple qu'à faible température normalisée et faible contrainte de cisaillement normalisée, le mécanisme de fluage de Coble domine le comportement en fluage du matériau (à une taille de grain de 10 microns). A une même température, si la contrainte normalisée est de l'ordre de 1.E-3, le mécanisme de glissement des joints de grains assisté par la diffusion de lacune dans les joints de grains est

dominant. Ainsi, en comparant les résultats de Yin à une carte de déformation correspondant au même matériau, on pourrait s'attendre à ce que le mécanisme de glissement de dislocations soit actif.

Généralement les mécanismes de fluage, qui dépendent des paramètres structurels et des conditions d'essais (e.g. température, taille de grain et contrainte) ont une expression phénoménologique selon la forme suivante :

$$\dot{\varepsilon} = \frac{A \cdot D \cdot G \cdot b}{kT} \left(\frac{b}{d} \right)^p \left(\frac{\sigma}{G} \right)^n \qquad (2.4.1)$$

Ici A est une constante numérique dépendent de la géométrie, D est le coefficient de diffusion, G est le module de cisaillement, b est la norme du vecteur de Burger, k est la constante de Boltzmann, T représente la température, d est la taille de grains, σ est la contrainte appliquée, p est l'exposant de taille et n est l'exposant de contrainte. On identifie le mécanisme de fluage actif grâce à l'évaluation des exposants de taille et de contrainte. Par exemple, si l'exposant de contrainte est égal à 1 et l'exposant de taille est égal à 2, on supposera que le mécanisme de déformation en fluage est le fluage de Nabarro Herring.

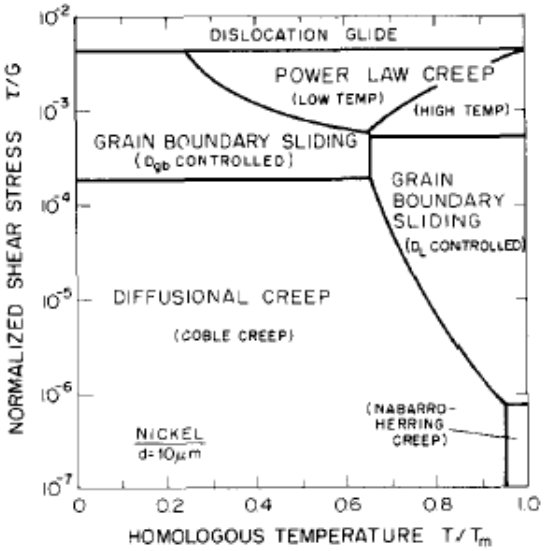
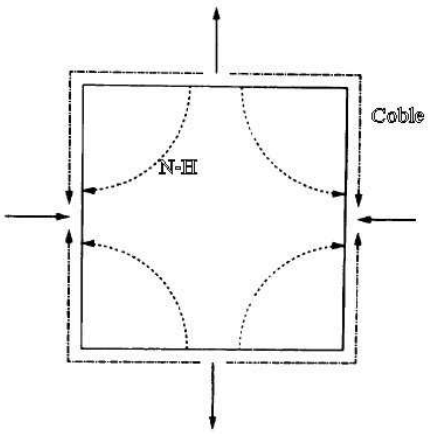


Figure II-14: Carte de déformation de Luthy (Luthy et al. 1979)

Les mécanismes de fluage de Nabarro Herring et de Coble se basent sur la diffusion de lacunes, en régime établi, le long de chemins préférentiels. Dans le cas du fluage de Nabarro Herring, les lacunes traversent les grains, engendrant une déformation du cristal à l'échelle macroscopique, alors que dans le cas du fluage de Coble, les lacunes se déplacent dans la zone inter granulaire. Présentons maintenant dans le détail les développements de Herring et de Coble, inspirés des travaux de Nabarro (Figure II-15).



(Shah et al. 1998)

Figure II-15:Chemin des lacunes dans les mécanismes de diffusion de Coble et de Nabarro Herring

2. Fluage de Nabarro Herring

Le développement de Herring, introduit dans le but de rationaliser le comportement quasi visqueux de fils métalliques en traction à faibles charges et à température élevée, relate du transport de matière par diffusion dans les cristaux. L'auteur suppose que le flux de matière est engendré par le gradient d'un potentiel chimique. Ce dernier dépend du gradient de la concentration de lacunes et du gradient de pression. Le flux de matière, noté ' j ', s'écrit comme suit :

$$j = -\left(\frac{n_L D}{kT}\right)\nabla\left(\mu - \mu_h\right) \qquad (2.4.2)$$

Où $n_L, D, k, T,$ et $\nabla\left(\mu - \mu_h\right)$ représentent respectivement, le nombre de sites par unité de volume, le coefficient d'autodiffusion de la matière, la constante de Boltzmann, la température et le travail, par atome, nécessaire à l'apport d'une faible quantité de matière au cristal. Afin d'assurer une concentration de lacunes constantes, le gradient du flux de matière doit être nul, il suffit alors de déterminer la condition aux limites sur $\left(\mu - \mu_h\right)$. Cette dernière est obtenue par la minimisation de l'énergie libre du cristal par rapport au transfert d'atomes entre la surface et le volume adjacent. En supposant l'équilibre surface volume mentionné ci-dessus, on obtient l'expression suivante du travail à fournir :

$$\mu - \mu_h = \mu_0 - p_{zz}\Omega_0 \qquad (2.4.3)$$

Où μ_0, p_{zz} et Ω_0 représentent respectivement le potentiel chimique de la source d'atomes, la traction normale et le volume atomique. Enfin, dans le cas de grains sphériques, la composante normale du vecteur traction est proportionnelle à l'inverse du carré de la taille du cristal. Herring traitent de deux cas distincts; le cas où la contrainte de cisaillement n'est pas encore relaxée au niveau des joints de grains, qui donnera lieu à des taux de déformation plus élevés, et le cas où cette contrainte est relaxée. On obtient dans les cas respectifs :

$$\mu - \mu_h = \mu_0 - \frac{\Omega_0}{d^2} \sum_{i,j} \sigma_{ij} x_i x_j \tag{2.4.4}$$

$$\mu - \mu_h = \mu_0 - \frac{5\Omega_0}{2d^2} \sigma_{xx} \left(x^2 - y^2 \right) \tag{2.4.5}$$

Où x_r r=i,j sont les coordonnées des points considérés et d est la taille de grain. Enfin, la loi de fluage est obtenue en considérant la relation entre le taux de déplacement, le taux de déformation et le flux normal, donnée par :

$$\frac{dr}{dt} = \sum_{i,j} \frac{1}{d} \dot{\varepsilon}_{ij} x_i x_j = \Omega_0 j_n \tag{2.4.6}$$

Typiquement, on écrit la loi de fluage de Nabarro Herring de la manière suivante :

$$\dot{\varepsilon}_{NH} = \frac{A_{NH} D_L G b}{kT} \left(\frac{b}{d} \right)^2 \left(\frac{\sigma}{G} \right) \tag{2.4.7}$$

Ici, σ est la contrainte appliquée, d est la taille de grain, G est le module de cisaillement, b est la norme du vecteur de Burger, D_L est le coefficient de diffusion des cristaux, k est la constante de Boltzmann, T est la température en Kelvin, A_{NH} est une constante numérique.

3. Fluage de Coble

Le modèle de fluage de Coble, dont le développement est semblable à celui de Herring, suppose que la diffusion de lacunes s'effectue le long des interfaces grain/joint de grain. D'après le raisonnement de Herring, la déformation du matériau est due à la dépendance de la concentration de vides à l'équilibre avec la contrainte et la température. L'expression du gradient de concentration de lacunes à l'équilibre se réduit à :

$$\Delta C = \frac{C_0 \cdot \sigma \cdot \Omega}{kT} \qquad (2.4.8)$$

Où C_0, σ, Ω, k et T représentent respectivement la concentration initiale de lacunes à l'équilibre, la contrainte normale au joint de grain, le volume atomique, la constante de Boltzmann et la température.

On impose aux joints de grains de conserver la même orientation au cours de la déformation afin d'assurer la conservation de volume des régions inter cristallines et la non-continuité des contraintes localisées à l'intersection des facettes du cristal. Cette condition est respectée dans le cas où chaque cristal a un taux de génération de lacune uniforme sur une face entière. Dans le cas de cristaux sphériques, on suppose alors les taux de génération et d'annihilation de lacunes uniformes et égaux. Ainsi, les aires des sources et puits de lacunes sont égaux afin d'obtenir une déformation à volume constant. Cette condition se réalise à 60 degrés sur un hémisphère. Il s'agit donc d'évaluer le gradient de concentration à cet angle précis. En régime établi et en appliquant la loi de Fick on obtient l'expression du flux de matière donné par :

$$J = D_v N w \frac{2\Delta C}{\pi d} d \sin 60 \qquad (2.4.9)$$

Ici, w est l'épaisseur moyenne des joints de grains, D_v est le coefficient de diffusion. Enfin, avec la relation entre le changement de volume et le flux de matière, on obtient l'expression du fluage de Coble, exprimé comme suit :

$$J a_0^3 = \pi d^2 \frac{dd}{dt} = 7.4 D_v w \Delta C a_0^3 \qquad (2.4.10) \quad \dot{\varepsilon} = \frac{7.4 D_b \sigma w a_0^3}{\pi k T d^3} \qquad (2.4.11)$$

Discussion :

Il est important de rappeler ici que l'activité des mécanismes de diffusion dans les matériaux NC est encore sujette à débat. Aussi, un nouveau mécanisme de fluage basé sur la diffusion de lacunes par les lignes triples à récemment été introduit (Wang et al. 1995). Son expression est la suivante :

$$\dot{\varepsilon} = K_{tl} \frac{D_{tl} \cdot \Omega \cdot \sigma}{kT} \frac{w^2}{d^4} \qquad (2.4.12)$$

Ici K_{tl} est une constante numérique, D_{tl} est le coefficient de diffusion des lignes triples, Ω est le volume atomique, w est l'épaisseur moyenne des joints de grains, k est la constante de Boltzmann, σ est la contrainte appliquée et T est la température en Kelvin.

D'après les expressions du fluage de Nabarro et Herring, du fluage de Coble et du fluage par les lignes triples, si les résultats expérimentaux relatant de la capacité des matériaux ne sont pas faussés par la présence de défauts dans les échantillons, on s'attend alors à ce que chacun des trois mécanismes de fluages domine dans un domaine de tailles de grain différents. Par exemple le fluage des lignes triples pourrait être dominant lorsque les tailles de grains sont inférieures à ~20 nm.

L'effet macroscopique des mécanismes de diffusion dépend du type de diffusion actif mais aussi de la fréquence à laquelle les phénomènes considérés se produisent. Dans le cas du fluage par les lignes triples, on peut aisément admettre que cette fréquence dépend du nombre de ligne triples, fréquence qui elle même dépend de la taille de grain. Il faut donc relativiser l'effet de ces mécanismes de fluages vis-à-vis de la fraction volumique de joints de grains, lignes triples et cristaux.

4. Glissement des joints de grains

Tout comme dans le cas des mécanismes de diffusion, il a été suggéré que le mécanisme de glissement des joints de grains puisse être actif dans les matériaux UF et NC, notamment dans les essais de fluages réalisés par Cai et al. sur des échantillons de Cu produit par électrodéposition (d=30nm) (Cai et al. 2001) et dans le essais de traction de Kumar et al (Kumar et al.2003).

Dans les matériaux conventionnels, le fluage par glissement des joints de grains peut être assisté par des mécanismes de diffusion de lacunes inter cristallins ou intra cristallin, ce mécanisme est connu sous le nom de glissement de Lifschitz. Les expressions phénoménologiques des mécanismes de fluages sont les suivantes :

- Dans le cas de l'accommodation par diffusion inter cristalline :

$$\dot{\varepsilon}_{jg} \approx 2.E5 \cdot D_{jg} \frac{Gb}{kT} \left(\frac{b}{d}\right)^3 \left(\frac{\sigma}{G}\right)^2 \qquad (2.4.13)$$

- Dans le cas de l'accommodation par diffusion intra cristalline :

$$\dot{\varepsilon}_c \approx 8.E6 \cdot D_c \frac{Gb}{kT}\left(\frac{b}{d}\right)^2\left(\frac{\sigma}{G}\right)^2 \qquad (2.4.14)$$

Ici, $\dot{\varepsilon}_r$, D_r r=jg, c dénotent respectivement les taux de déformation moyen viscoplastiques et le coefficient de diffusion dans les joints de grains et dans les cœurs de grains, b est la norme du vecteur de Burger, k est la constante de Boltzmann, T est la température en Kelvin, d est la taille de grain, G est le module de cisaillement, et σ est la contrainte appliquée. Notons les similarités entre l'expression (2.4.13) et l'expression du fluage de Coble et entre l'expression (2.4.14) et l'expression du fluage de Nabarro Herring.

Discussion :

Nous rappelons ici encore que l'activité des mécanismes de diffusion dans les matériaux NC est toujours sujette à débat. En effet, les premières expériences de fluages rapportent pour la plupart des taux de déformation indiquant que les mécanismes de diffusion soient actifs dans les joints de grains. Ces mesures s'expliqueraient alors d'une part par le fait que la fraction de volumique de joints de grains devienne non négligeable dans le régime NC et d'autres parts par le fait que les distances interatomiques dans les joints de grains soient plus élevées dans le régime NC. Ce sont ces mesures qui nous ont motivé à évaluer l'effet du mécanisme de fluage de Coble. Cependant, des expériences de fluage plus récentes réalisées sur des matériaux de meilleure qualité, ne comportant pas de microfissure dans leurs structures initiales, rapportent elles des taux de déformation en fluage du même ordre que celle observées dans les matériaux conventionnels. Ainsi, ces mesures expérimentales suggèrent que les mécanismes de diffusions ne soient pas actifs dans le régime NC. De plus, d'autres essais expérimentaux, tels que ceux réalisés par Kumar et al. (Kumar et al., 2003) révèlent la croissance de fissures menant à l'endommagement du matériau durant des essais de traction. Ici encore, cela tend à démontrer que les mécanismes de diffusions de lacunes ne soient pas actifs.

5. Emission de dislocations par les joints de grains:

Comme précisé précédemment, de récentes simulations de DM si bien 2D columnaires que 3D ont montré que le mécanisme d'émission de dislocations par les joints de grains puisse mené à l'adoucissement du comportement viscoplastique des matériaux NC. Bien que les simulations de DM puisse ne pas être représentatives du comportement en régime quasi-statique, car les conditions ont limites ont des ordres de grandeurs nettement supérieurs au cas quasi-statique, il est tout de même probable que ce mécanisme d'émission de dislocation soit actif dans le cas des NC. Notamment car les expérience du Kumar et al. (Kumar et al., 2003) sur des échantillons de Nickel électrodéposé suggèrent elles aussi l'activité de ce mécanisme.

Le mécanisme d'émission fut suggéré dans les travaux de Li dès les années 1960. Cependant, peu de travaux on été consacré au rôle de source de dislocation des joints de grains. Ainsi, il n'existe pas encore de loi de comportement permettant d'évaluer l'effet macroscopique de ce mécanisme. C'est d'ailleurs pour cette raison que nous proposons une nouvelle loi de comportement à cet effet (Chapitre V). De plus, il existe encore de nombreuses incertitude squant à ce mécanisme, telle que la nature des sources principales de dislocations localisées dans les joints de grain.

Il existe trois types de sources de dislocations inter cristallines: les désinclinaisons, les joints de grains à faibles angles d'inclinaisons qui sont semblables aux sources de Frank et Read (Hirth et al. 1982), et les ledges. Ces derniers sont des plans d'atomes supplémentaires localisés à l'interface grain/joints de grains que l'on pourra se représenter comme des "marches".

Bien que les joints de grains à faibles angles d'inclinaison puissent émettre des dislocations dans les cœurs de grains, ce type de source peut être négligée car leur concentration est faible dans les matériaux NC. Rappelons que la concentration de joints de grains à faibles angles d'inclinaison dépend du procédé de fabrication.

Dès 1963, dans les travaux de Li déjà mentionnés auparavant, il a été supposé que les « ledges » puissent agir comme des donneurs de dislocations. Murr et Venkatesh ont consacré de nombreux travaux à l'étude expérimentale des ledges (Venkatesh et al.; Venkatesh et al. 1976; Murr et al. 1978; Venkatesh et al. 1978; Murr 1981), il fut observé entres autres choses que, dans les matériaux conventionnels très purs, les ledges peuvent effectivement émettre des dislocations dans les cœurs de grains. De plus, le fait que les sources de dislocations soient actives dans le cas de matériaux conventionnels de grande pureté suggère que l'activité de ces sources de dislocations dépend de la densité de dislocations stockées dans les coeurs de grains, dans le sens où ces dernières génèrent des contraintes aux joints de grains limitant l'émission de dislocations.

Enfin, comme le prédisent les modèles des joints de grains basés sur les unités de désinclinaisons, un joint de grain à fort angle d'inclinaison peut lui aussi émettre des dislocations suite au mouvement d'un dipôle de désinclinaison par exemple. Les modèles de Gurtin et al. (Gutkin et al. 2003), basés sur les différences d'énergies du système pré et post émission, démontrent que l'émission de dislocations peut être favorable dans de nombreuses configurations en fonction de l'angle d'inclinaison et de l'angle d'émission.

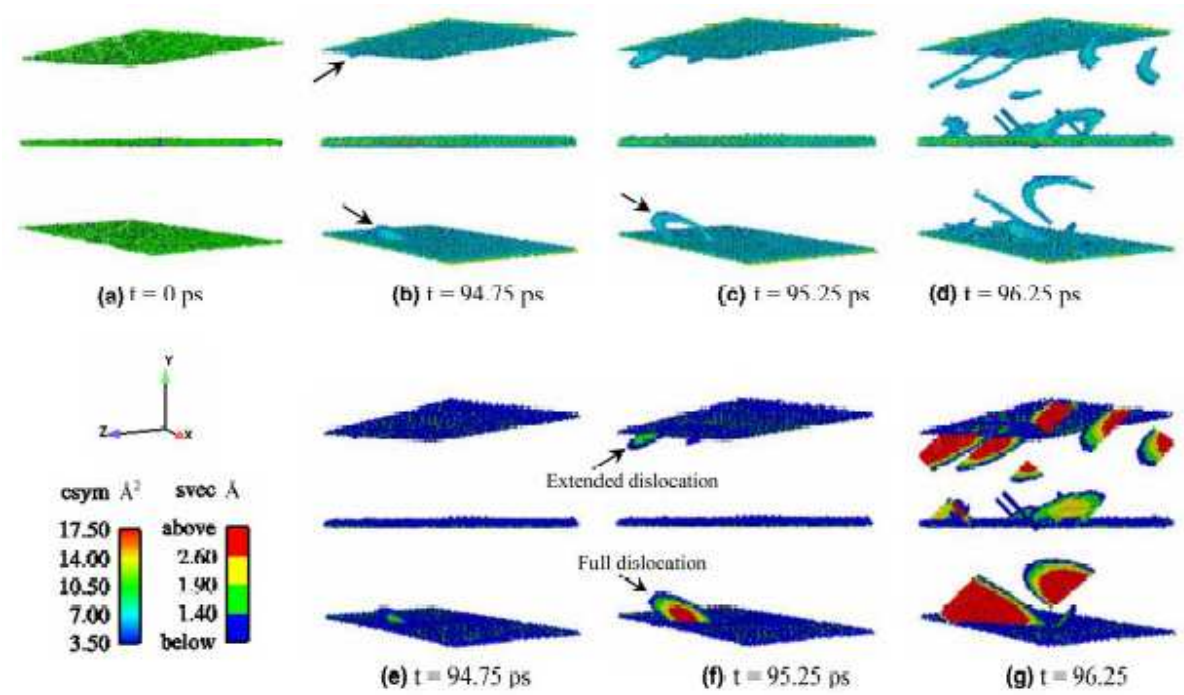
L'émission de dislocations par les joints de grains peut être modélisée grâce à la représentation des joints de grains basée sur les unités de désinclinaison. Hurtado et al. proposent deux approches pour modéliser l'émission de dislocations (Hurtado et al. 1995). Dans une première approche on considère que l'émission d'une dislocation engendre la création d'une désinclinaison négative. Cependant cette approche

mène à un joint de grain instable. Pour remédier à cela, on suppose par la suite que l'émission engendre la création d'une dislocation négative localisée au niveau du site d'émission.

De nombreux travaux de DM et DS ont été consacrés à l'émission de dislocations. Suite aux premières simulations de DM sur des nanocristaux deux dimensions columnaires d'aluminium de tailles comprises entre 20 et 70 nm (Yamakov et al. 2001), l'émission de dislocations partielles par les joints de grains fut mise en exergue. L'équipe de Gleiter et Wolf montra alors que la seconde dislocation partielle de Shockley est émise si la taille de grain est supérieure à la distance de séparation entre les deux dislocations partielles. Cette distance critique dépend de l'énergie des défauts d'empilement (Hirth et al. 1982). Ceci suggère que lorsque la taille de grain est très petite, une seule dislocation partielle peut être émise, créant un défaut d'empilement permanant derrière son passage. On s'attendrait alors à ce que l'émission d'une seule dislocation de Shockley n'ait pas lieu dans les matériaux à forte énergie de défaut d'empilement tel que l'aluminium. Les simulations tridimensionnelles sur des nanocristaux de cuivre et de nickel de taille de grain variant de 5 à 12 nm montrent elles aussi l'émission de dislocations partielles par les joints de grain (Derlet et al. 2002). Cependant, il fut argumenté alors que la non émission de la seconde dislocation partielle peut être due à relaxation du joint de grains par mouvement d'atomes accompagnant l'émission de la première dislocation partielle. Dans des travaux plus récents, l'équipe de Van Swygenhoven révise sa première hypothèse et suggère alors que le fait que la DM ne permette pas de prédire dans tous les cas l'émission de la seconde dislocation partielle de Shockley peut être lié aux limitations des simulations de DM. En effet, pour les raisons mentionnées dans l'introduction générale, les simulations de DM sont limitées à des temps réels très courts, de l'ordre de quelques dizaines de picosecondes. Ainsi des temps de calcul plus longs pourraient révéler l'émission de la seconde dislocation partielle. Enfin les derniers travaux publiés de l'équipe de Van Swygenhoven suggèrent que le rapport de l'énergie stable et instable des défauts d'empilement peut être un critère de prédiction de l'émission de la seconde dislocation partielle (Froseth et al. 2004).

Dans le but d'investiguer l'effet de l'émission de dislocations sur les joints de grain, quelques travaux de DM se sont focalisés sur l'étude de bicristaux. Les simulations de traction de Spearot et al. montrent que l'émission d'un boucle complète de dislocation par l'interface génère un ledge localisé à la source de dislocation (Spearot et al. 2005; Spearot et al. 2005). Dans la Figure II-16, on observe l'émission de dislocations par les interfaces, les atomes sont colorés avec la convention de la symétrie centrale (seuls les atomes n'appartenant pas à une structure cristalline sont représentés). On observe notamment l'émission d'une boucle complète de dislocation. Les simulations de DM révèlent que, comme dans le cas du glissement des dislocations dans les cœurs de grains, les joints de grains émettent des dislocations uniquement sur les systèmes de glissement favorable. D'autre part, les simulations de Spearot et al. sur les interfaces dissociés montrent aussi que la distance entre les facettes intrinsèques de défaut d'empilement est un facteur critique pour l'émission de dislocations (Spearot et al. 2005). Ces dernières pouvant retenir la

dislocation émise. Enfin, le modèle quasi continu (éléments finis et DM) de Sansoz et Molinari révèle qu'un mouvement d'atomes peut se produire avant l'émission de dislocations dans le cas où les joints de grain est constitué d'unité structurelles de type E et où une contrainte de cisaillement pure est appliquée à la source (Sansoz et al. 2005).



(Spearot et al. 2005)

Figure II-16: Simulation de DM de l'émission de dislocations

6. Modèles

Un nombre conséquents de modèles, ayant pour objectif principal de prédire la chute de la loi de Hall et Petch, ont été développés lors de cette dernière décennie. Pour la plupart, les développements se basent sur des modèles composites à deux phases. La phase inclusionnaire représente les cœurs de grains et la phase matrice représente les joints de grains et lignes triples (Kim et al. 2000). Le comportement macroscopique du matériau est le plus souvent homogénéisé à l'aide de simples lois des mélanges (Kim et al. 2000) (Carsley et al. 1995; Konstantinidis et al. 1998). Ceci présente l'avantage de mener à des modèles simples d'un point de vue numérique, mais relativement imprécis. De plus, conséquemment aux premières hypothèses sur la structure des joints de grains et au manque de connaissance de leur comportement, les joints de grains sont très souvent considérés amorphes (Kim et al. 2001; Kim et al. 2001; Jiang et al. 2004; Capolungo et al. 2005).

Notons que le modèle de Jiang et al. présente l'originalité d'être basé sur un schéma micromécanique plus complexe, faisant appel aux développements de Christensen et Lo (Christensen et al. 1979) et de Luo et Weng (Luo et al. 1987) où le cœur de grain et son joint de grain adjacent son plongés dans un milieu effectif. Les prédictions du modèle ne sont pénalisées que par le manque de précision dans la description des mécanismes de déformations actifs.

Enfin, suite aux premiers résultats expérimentaux sur le fluage des matériaux NC, où il fut observé que les matériaux NC peuvent fluer à température ambiante, nombreux sont les modèles incorporant des mécanismes de déformations typiquement observé dans le cas des comportements superplastiques (Hahn et al. 1997) (Hahn et al. 1997). L'objectif de cette section n'étant pas de faire une liste exhaustive des modèles ayant été développé jusqu'alors, seuls les modèles plus souvent cités dans la littérature seront présentés. Une discussion approfondie du fondement de ces conceptualisations sera présentée dans la suite de ce document.

a) Modèles de Kim et al.

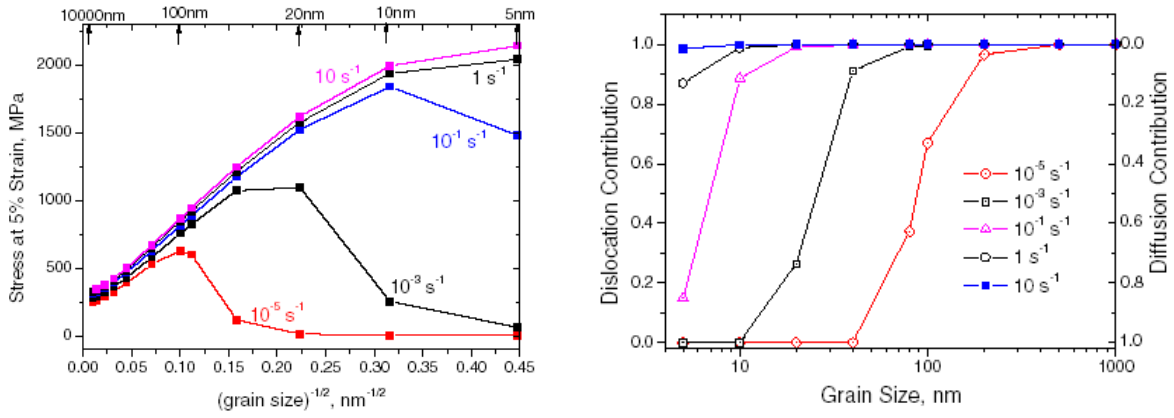
Kim et al. ont développés et approfondit une série de modèles viscoplastiques composites à deux phase où le comportement de la phase inclusionnaire tient compte du glissement des dislocations, dont l'expression est basée sur les travaux de Estrin et al. (Estrin et al. 1984), et des phénomènes de diffusions de lacunes inter et intra granulaire, représentés par les mécanismes de fluages de Nabarro Herring et de Coble (Kim et al. 2000; Kim et al. 2001; Kim et al. 2005). Notons que dans les deux premiers modèles, les auteurs basent leur développement sur une densité de dislocation normalisée. De plus, une fonction de Heavyside est introduite dans la description de l'évolution de la densité de dislocations. Ainsi, lorsque la taille de grain est inférieure à 10 nm, la densité de dislocation est constante. Cette hypothèse se fonde sur le fait que l'activité des dislocations est supposé nulle lorsque d< 10 nm.

Dans le cas des deux premiers modèles, le comportement de la phase représentant les joints de grains et lignes triples est pseudo amorphe. Lorsque la contrainte locale est supérieure à 900 MPa., les auteurs supposent alors la contrainte locale constante. En dessous de cette limite, le comportement viscoplastique résulte d'un transfert de masse en régime établie dont l'expression est donnée par :

$$\dot{\varepsilon}_{bd} = \frac{2\Omega_b \sigma}{kT} \frac{D_{bd}^{sd}}{d^2} \qquad (2.4.15)$$

Où $\Omega_b, k, T, D_{bd}^{sd}, d$ et σ représentent respectivement le volume atomique dans le joint de grains, la constante de Boltzmann, la température, le coefficient d'autodiffusion dans le joint de grains, la taille de grain et la contrainte locale.

La Figure II-17 a) et b) présente les prédictions du modèle de Kim et al. (2005). Les prédictions de l'évolution de la contrainte à 5% de déformation en fonction de l'inverse de la taille de grain (Figure II-17a)) sont globalement en accord avec les résultats expérimentaux dans le sens où la contrainte d'écoulement augmente d'une manière quasi linéaire jusqu'à une taille de grain critique, qui croît avec une augmentation du taux de déformation, où l'on observe un chute de la loi de Hall et Petch. La chute de la loi de Hall et Petch émerge de la domination du mécanisme de glissement de dislocations par les phénomènes de diffusion (Figure II-17 b)).



a) b)

Figure II-17: Prédiction du model de Kim et al.: a) Evolution de la contrainte à 5% de déformation avec la taille de grain et, b) Evolution des contributions des mécanismes de diffusions et de glissements des dislocations avec la taille de grains (Kim et al. 2005).

Cependant les modèles de Kim et al. ne sont pas en accord avec la majorité des mesures expérimentales et peuvent même mener à des prédictions n'ayant pas de sens physique. Par exemple, lorsqu'un taux de déformation de 1.E-5/s est imposé au matériau, la taille de grain critique se situe aux environs de 100 nm, ce qui correspond à une discordance de plus de 300% par rapport aux mesures expérimentales. De plus, on observe aussi qu'à faibles taux de déformation et très petite taille de grain (d< 20 nm), le modèle peut prédire une contrainte d'écoulement de l'ordre de 0 MPa., ce qui ne semble pouvoir trouver une quelconque explication physique. Ces résultats peuvent être issu du fait que la loi de comportement des joints de grains n'est pas appropriée. En effet, les auteurs fondent leur raisonnement sur un transfert de masse en régime établi, ce qui dans un essai de traction quasi statique ne saurait s'établir si rapidement. De plus, le mécanisme de déformation des joints de grains se base sur un transfert de masse

localisé dans les joints de grains, ce qui peut être aussi interprété comme un transfert de lacunes en direction opposé du transfert de masse (effet Kirkendall). Or, le transfert de lacunes est déjà pris en compte par les mécanismes de Coble et de Nabarro Herring, d'ailleurs le développement de Kim et al. s'appuie globalement sur le même développement de Coble.

Réferences partielles

Ashby, M. F. (1970). "The deformation of plastically non homogeneous materials." Philosophical magazine **21**: 399-424.

Balluffi, R. W. and P. D. Bristowe (1984). "On the structural unit/grain boundary dislocation model for grain boundary structure." Surface Science **144**(1): 28-43.

Balluffi, R. W. and P. D. Bristowe (1984). "On the structural unit/grain boundary dislocation model for grain boundary structure." Surface Science Letters **144**(1): A327.

Cai, B., Q. P. Kong, et al. (2001). "Creep behavior of cold-rolled nanocrystalline pure copper." Scripta Materialia **45**(12): 1407-1413.

Cai, B., Q. P. Kong, et al. (2000). "Low temperature creep of nanocrystalline pure copper." Materials Science and Engineering A **286**(1): 188-192.

Capolungo, L., C. Jochum, et al. (2005). "Homogenization method for strength and inelastic behavior of nanocrystalline materials." International journal of plasticity **21**: 67-82.

Carsley, J. E., J. Ning, et al. (1995). "A simple, mixture based model for the grain size dependence of strength in nanophase metals." Nanostructured materials **5**: 441-448.

Cheng, S., E. Ma, et al. (2005). "Tensile properties of in situ consolidated nanocrystalline Cu." Acta Materialia **53**(5): 1521-1533.

Cheong, K. S. and E. P. Busso (2004). "Discrete dislocation density modelling of single phase FCC polycrystals aggregates." Acta materialia **52**: 5665-5675.

Cheung, C., F. Djuanda, et al. (1995). "Electrodeposition of nanocrystalline Ni-Fe alloys." Nanostructured Materials **5**(5): 513-523.

Christensen, R. M. and K. H. Lo (1979). "Solutions for the effective shear properties in three phase sphere and cylinder models." Journal of the mechanics and physics of solids **27**: 315-330.

Coble, R. L. (1963). "A Model for Boundary Diffusion Controlled Creep in Polycrystalline Materials." Journal of Applied Physics **34**(6): 1679-1682.

Dalla Torre, F., H. Van Swygenhoven, et al. (2002). "Nanocrystalline electrodeposited Ni: microstructure and tensile properties." Acta materialia **50**: 3957-3970.

De Wit, R. (1973). J. Res. Nat. Bur. Stand.A **77**: 607.

Derlet, P. M. and H. Van Swygenhoven (2002). "length scale effects in the simulation of deformation properties of nanocrystalline metals." Scripta materialia **47**: 719-724.

Ebrahimi, F. and Z. Ahmed (2003). "The effect of substrate on the microstructure and tensile properties of electrodeposited nanocrystalline nickel." Materials Characterization **49**: 373-379.

Ebrahimi, F., G. R. Bourne, et al. (1999). "Mechanical properties of nanocrytsalline nickel produced by electrodeposition." Nanostructured Materials **11**(3): 343-350.

Erb, U. (1995). "Electrodeposited nanocrystals: synthesis, structure, properties and future applications." Canadian Metallurgical Quarterly **34**(3): 275-280.

Erb, U., G. Palumbo, et al. (1997). "Electrodeposited vs. consolidated nanocrystals: differences and similarities." Nanostructured Materials **9**: 261-270.

Estrin, Y. (1998). "Dislocation theory based constitutive modelling: foundations and applications." Journal of the materials processing technology **80-81**: 33-39.

Estrin, Y. and H. Mecking (1984). "A unified phenomenolgical description of work hardening and creep based on one parameter models." Acta metallurgica **32**: 57_70.

Froseth, A., H. Van Swygenhoven, et al. (2004). "The influence of twins on the mechanical properties of nc-Al." Acta materialia **52**: 2259-2268.

Furukawa, M., Z. Horita, et al. (1996). "Microstructural characteristics of an ultrafine grain metal processed with equal-channel angular pressing." Materials Characterization **37**(5): 277-283.

Gleiter, H. (1982). "On the structure of grain boundaries in Metals." Materials science and engineering **52**: 91-131.

Granqvist, C. G. and R. A. Buhrman (1976). Journal of applied physics **47**: 2200.

Gui-Jin Wang and V. Vitek (1986). "Relationships between grain boundary structure and energy." Acta Metallurgica **34**(5): 951-960.

Gutkin, M. Y., I. A. Ovid'Ko, et al. (2003). "Transformation of grain boundaries due to disclination motion and emission of dislocations pairs." Materials science and engineering **A339**: 73-80.

Haas, V. and R. Birringer (1992). "The morphology and size of nanostructured Cu, Pd and W generated by sputtering." Nanostructured Materials **1**: 491-504.

Hahn, H. and R. S. Averback (1989). "The production of nanocrystalline powders by magnetron sputtering." Journal of applied physics **67**(2): 1113-1115.

Hahn, H., P. Mondal, et al. (1997). "Plastic deformation of nanocrystalline materials." Nanostructured materials **9**: 603-606.

Hebesberger, T., H. P. Stüwe, et al. (2005). "Structure of Cu deformed bby high pressure torsion." Acta materialia **53**: 393-402.

Herring, C. (1950). "Diffusional Viscosity of a Polycrystalline Solid." Journal of Applied Physics **21**(5): 437-445.

Hirth, J. P. and J. Lothe (1982). Theroy of dislocations. New York.

Horita, Z., D. J. Smith, et al. (1996). Journal of Mater. Res. **11**: 1880.

Huang, J. Y., Y. K. Wu, et al. (1995). "Deformation structures in ball milled copper." Acta materialia **44**: 1211-1221.

Hurtado, J. A., B. R. Elliot, et al. (1995). "Disclination grain boundary model with plastic deformation by dislocations." Materials Science and Engineering A **190**: 1-7.

Iwahashi, Y., Z. Horita, et al. (1997). "An investigation of microstructural evolution during equal-channel angular pressing." Acta Materialia **45**(11): 4733-4741.

Iwahashi, Y., Z. Horita, et al. (1997). "The process of grain refinement in equal channel angular pressing." Acta materialia **46**(9): 3317-3331.

Iwahashi, Y., Z. Horita, et al. (1998). Metall.Mater. Trans. A **29A**: 2503.

Iwasaki, H., K. Higashi, et al. (2004). "Tensile deformation and microstructure of a nanocrystalline Ni-W alloy produced by electrodeposition." Scripta materialia **50**: 395-399.

Jiang, B. and G. J. Weng (2004). "A generalized slef consistent polycrystal model for the yield strength of nanocrystalline materials." Journal of the mechanics and physics of solids **52**: 1125-1149.

Karaman, I., H. Sehitoglu, et al. (2000). "Modeling the deformation behavior of Hadfield steel single and polycrystals due to twinning and slip." Acta materialia **48**: 2031-2047.

Ke, M., S. A. Hackney, et al. (1995). "Observations and measurement of grain rotation and plastic strain in nanostructured metal thin films." Nanostructured materials **5**: 689-697.

Khan, A. S., H. Zhang, et al. (2000). "Mechanical response and modeling of fully compacted nanocrystalline iron and copper." International journal of plasticity **16**: 1459-1476.

Kim, H. S. and Y. Estrin (2005). "Phase mixture modeling of the strain rate dependent mechanical behavior of nanostructured materials." Acta materialia **53**: 765-772.

Kim, H. S., Y. Estrin, et al. (2000). "Plastic deformation behaviour of fine grained materials." Acta materialia **48**: 493-504.

Kim, H. S., Y. Estrin, et al. (2001). "Constitutive modelling of strength and plasticity of nanocrystalline metallic materials." Materials science and engineering **A316**: 195-199.

Kim, H. S., M. H. Seo, et al. (2001). "Plastic deformation analysis of metals during equal channel angular pressing." Journal of Materials Processing Technology **113**: 622-626.

Kocks, U. F. (1976). "Laws for work hardening and low temerature creep." Transactions of the ASME: 76-85.

Kocks, U. F., U. F. Argon, et al. (1975). Progress in materials science **19**: 110-170.

Kocks, U. F. and H. Mecking (2003). "Physics and phenomenology of strain hardening." Progress in materials science **48**: 171-273.

Konstantinidis, D. A. and E. C. Aifantis (1998). "On the "anomalous" hardness of nanocrystalline materials." Nanostructured materials **10**: 1111-1118.

Köster, U., U. Schünemann, et al. (1991). "Nanocrystalline materials by crystallization of metal-metalloid glasses." Materials Science and Engineering A **133**: 611-615.

Kuhlman-Wilsdorf, D. (1962). Trans Met Soc AIME **218**: 962.

Kumar, K. S., S. Suresh, et al. (2003). "Deformation of electrodeposited nanocrystalline nickel." Acta materialia **51**: 387-405.

Kumar, K. S., H. Van Swygenhoven, et al. (2003). "Mechanical behavior of nanocrystalline metals and alloys." Acta materialia **51**: 5743-5774.

Li, J. C. M. (1963). "Petch relation and grain boundary sources." Transactions of the metallurgical society of AIME **227**: 239.

Li, J. C. M. (1972). Surface science **31**: 12.

Li, Y. J., W. Blum, et al. (2004). "Does nanocrystalline Cu deform by Coble creep near room temperature?" Materials Science and Engineering A **387-389**: 585-589.

Loss, H. V. (1901). "The flow of metal." Journal of the Franklin Institute **151**(6): 456-464.

Lu, K., R. Luck, et al. (1993). "The interfacial excesss energy in nanocrystalline Ni-P materials with different grain sizes." Scripta Metallurgica et materialia **28**: 1387-1392.

Luo, H. A. and G. J. Weng (1987). "On Eshelby's inclusion problem in a three phase sphreically concentric solid and a modification of Mori-Tanaka's method." Mechanics of materials **6**: 347-361.

Luthy, H., R. A. White, et al. (1979). "Grain boundary sliding and deformation mechanism maps." Materials Science and Engineering **39**(2): 211-216.

Mecking, H. and U. F. Kocks (1981). "Kinetic of flow stress and strain hardening." Acta metallurgica **29**: 1865-1875.

Mikaelyan, K. N., I. A. Ovid'ko, et al. (2000). "Disclination-structural-unit model of quasiperiodic tilt boundaries of finite extent." Materials Science and Engineering A **288**(1): 61-65.

Murr, L. E. (1981). "Strain induced dislocation emission from grain boundaries in stainless steel." Materials science and engineering **51**: 71-79.

Murr, L. E. and E. Venkatesh (1978). "Contrast phenomena and indentification of grain boundary ledges." Metallography **11**: 61-79.

Nabarro, F. R. N. (1948). "Report of conference on Strength of Solids." Physical Society London.

Nakashima, K., Z. Horita, et al. (1998). "Influence of channel angle on the development of ultrafine grains in equal-channel angular pressing." Acta Materialia **46**(5): 1589-1599.

Nazarov, A. A., O. A. Shenderova, et al. (2000). "On the disclination-structural unit model of grain bounfdaries." Materials Science and Engineering A **281**: 148-155.

Nes, E. (1997). "Modelling of work hardening and stress saturation in FCC metals." Progress in materials science **41**: 129-193.

Nieh, T. G. and J. G. Wang (2005). "Hall Petch relationship in nanocrystalline Ni and Be-B alloys." Intermetallics **13**: 377-385.

Nieman, G. W., J. R. Weertman, et al. (1989). "Mcrohardness of nanocrystalline paladiuù and copper produced by inert gas condensation." Scripta Metallurgica **23**: 2013-2018.

Nishikawa, S. and G. Asahara (1920). "Some studies of metals by means of X-rays : and . (Phys. Rev., January, 1920)." Journal of the Franklin Institute **189**(5): 688.

Qin, W., Z. Chen, et al. (1999). "Dislocation pileups in nanocrusyalline materials." Journal of alloys and compounds **289**: 285-288.

Qin, W., Z. H. Chen, et al. (1999). "Crystal lattice expansion of nanocrystalline materials." Journal of Alloys and Compounds **292**: 230-232.

Qin, W., Y. W. Du, et al. (2002). "Dislocation stability and configuration in the crystallites of nanocrystalline materials." Journal of alloys and compounds **337**: 168-171.

Ranganathan, S., R. Divakar, et al. (2000). "Interface structures in nanocrystalline materials." Scripta materialia **27**: 1169-1174.

Read, W. T. and W. Schockley (1950). "Dislocations models of crystal grain boundaries." Physical Review **78**(3): 275-289.

Romanov, A. E. (2003). "Mechanics and physics of disclinations in solids." European Journal Of Mechanics A/Solids **22**: 727-741.

Sakai, G., Z. Horita, et al. (2005). "Grain refinement and superplasticity in an aluminum alloy processed by high pressure torsion." Materials science and engineering **A393**: 344-351.

Sanders, P. G., J. A. Eastman, et al. (1997). "Elastic and tensile behavior of nanocrystalline copper and palladium." Acta metallurgica **45**: 4019-4025.

Sanders, P. G., M. Rittner, et al. (1997). "Creep of nanocrystalline Cu, Pd, and Al-Zr." Nanostructured Materials **9**(1-8): 433-440.

Sansoz, F. and J. F. Molinari (2005). "Mechanical behavior of Sigma tilt grain boundaries in nanoscale Cu and Al: a quasicontinuum study." Acta materialia **xxx**: xxx-xxx.

Segal, V. M., V. I. Reznikov, et al. (1981). Metally: 1-115.

Shah, S. and A. H. Chokshi (1998). "The significance of diffusional flow in ultrafine-grained materials." Colloids and Surfaces A **133**: 57-61.

Shih, K. K. and J. C. M. Li (1975). Surface science **50**: 109.

Spearot, D. E., K. I. Jacob, et al. (2005). "Dislocation nucleation from bycrystal interfaces with dissociated structure." xxxxx **xxx**: xxx-xxx.

Spearot, D. E., K. I. Jacob, et al. (2005). "Nucelation of dislocations from [001] bicrystal interfaces in aluminum." Acta materialia **xxx**: xxx-xxx.

Stokes, R. J. and A. H. Cottrel (1954). "Work softening in aluminium crystals." Acta metallurgica **2**.

Sutton, A. P., R. W. Balluffi, et al. (1981). "On intrinsic secondary grain boundary dislocation arrays in high angle symmetrical tilt grain boundaries." Scripta Metallurgica **15**(9): 989-994.

Sutton, A. P. and V. Vitek (1980). "On the coincidence site lattice and DSC dislocation network model of high angle grain boundary structure." Scripta Metallurgica **14**(1): 129-132.

Sutton, A. P. and V. Vitek (1980). "On the use of the energy-misorientation relationship of grain boundaries in modelling grain boundary defects and properties." Scripta Metallurgica **14**(5): 563-567.

Sutton, A. P. and V. Vitek (1982). "An atomistic study of tilt grain boundaries with substitutional impurities." Acta Metallurgica **30**(11): 2011-2033.

Taylor, G. I. (1934). "The mechanism of plastic deformation of crystals: Part 1 theoretical." Proceedings of the Royal Society A **CXLV**(362-387).

Van Petegem, F. Dalla Torre, et al. (2003). "Free volume in nanostructured Ni." Scripta materialia **48**: 17-22.

Van Swygenhoven, H. and A. Caro (1997). "Molecular dynamics computer simulation of nanophase Ni: structure and mechanical properties." Nanostructured materials **9**: 669-672.

Van Swygenhoven, H., A. Caro, et al. (2001). "Grain boundary structure and its influence on plastic deformation of polycrystalline FCC metals at the nanoscale: a molecular dynamics study." Scripta materialia **44**: 1513-1516.

Venkatesh, E. S. and L. E. Murr Effect of grain boundary ledges on the flow stress in Nickel. Thirty-fith annual EMSA meeting**.**

Venkatesh, E. S. and L. E. Murr (1976). "Variations in grain boundary ledge structure with thermomechnical treatment in high purity aluminum." Scripta metallurgica **10**: 477-480.

Venkatesh, E. S. and L. E. Murr (1978). "The influence of grain boudanry ledge density on the flow stress in Nickel." Materials science and engineering **33**: 69-80.

Vinogradov, A., T. Ishida, et al. (2005). "Effect of strain path on structure and mechanical behavior of ultra-fine grain Cu-Cr alloy produced by equal-channel angular pressing." Acta materialia **53**: 2181-2192.

Volterra, V. (1907). Ann. Ecole Normale Supérieure de Paris **24**: 401.

W. (1898). "The metallographist : A quarterly publication devoted to the study of metals, with special reference to their physics and microstructure, their industrial treatments and applications. Edited by Albert Sauveur. Published by the Boston Testing Laboratories, 446 Tremont Street, Boston, Mass., U. S. A. [Price, $2 per annum]." Journal of the Franklin Institute **146**(1): 76.

Wang, N., Z. Wang, et al. (1995). "Effect of grain size on mechanical properties of nanocrystalline materials." Acta Metallurgica et Materialia **43**(2): 519-528.

Wang, Y. M., K. Wang, et al. (2003). "Microsample testing of nanocrystalline copper." Scripta materialia **48**: 1581-1586.

Wei, Q., S. Cheng, et al. (2004). "Effect of nanocrystalline and ultrafine grain sizes on the strein rate sensitivity and activation volume: fcc versus bcc metals." Materials science and engineering **A 381**: 71-79.

Yamakov, V., D. Wolf, et al. (2001). "Lenght scale effects in the nucleation of extended dislocations in nanocrystalline Al by molecular dynamics simulation." Acta materialia **49**.

Yamashita, A., D. Yamaguhi, et al. (2000). "Influence of pressing temperature on microstructural development in equal-channel angulat pressing." Materials science and engineering **A287**: 100-106.

Yang, Z. and U. Welzel (2005). "Microstructure-microhardness relation of nanostructured Ni produced by high-pressure torsion." Materials Letters **59**: 3406-3409.

Yin, W. M., S. H. Whang, et al. (2001). "Creep behavior of nanocrystalline nickel at 290 and 373 K." Materials Science and Engineering A **301**(1): 18-22.

Youssef, K. M., R. O. Scattergodd, et al. (2004). "Ultrtough nanocrystalline copper with a narrowgrain size distribution." Applied Physics Letters **85**(6): 929-931.

Zhang, K., I. V. Alexandrov, et al. (1997). "The X-ray diffraction study on a nanocrystalline CU processed by equal-channel angular pressing." Nanostructured Materials **9**(1-8): 347-350.

Zhilyaev, A. P., S. Lee, et al. (2001). "Microhardness and microstructural evolution in pure nickel during high pressure torsion." Scripta materialia **44**: 2753-2758.

Zhilyaev, A. P., G. V. Nurislimova, et al. (2003). "Experimental parameters influencing grain refinement and microstructural evolution during high pressure torsion." Acta materialia **51**: 753-765.

Zhonghao, J., L. Jianshe, et al. (1995). "A dislocation density approximation for the flow stress-grain size relation of polycrystals." Acta Metallurgica et Materialia **43**(9): 3349-3360.

Zhou, Y., U. Erb, et al. (2003). "The effect of triple junctions and grain boundaries on hardness and Young's modulus in nanostructured Ni-P." Scripta materialia **48**: 825-830.

Chapitre III. Réfléxions

Dans ce chapitre nous proposons une discussion traitant de l'activité des mécanismes de déformations présentés au chapitre précédent. Entre autre, nous rationalisons la contribution de chacun des mécanismes en fonction de la taille de grain. En effet, il semble important de comprendre quels sont les raisons pour lesquels l'activité des dislocations et le rôle des joints de grains change en fonction de la taille de grain. Cette réflexion nous permet d'établir une première carte des déformations qui fera par la suite l'objet de nos investigations. Dans un premier temps nous nous consacrerons à l'activité des dislocations et dans un second temps à l'activité des autres mécanismes de déformation.

A. L'activité des dislocations

Traitons désormais de l'activité des dislocations. Comme nous l'avons précisé auparavant, dans le domaine NC l'activité des dislocations pourrait diminuer avec une diminution de la taille de grain, jusqu'à ce qu'une taille de grain critique (d~10 nm) soit atteinte où l'activité des dislocations deviendrait nulle.

Dans le cas des matériaux conventionnels, l'écrouissage est une conséquence directe de l'activité des dislocations dont la densité évolue par les mécanismes de stockage et d'annihilation, et, dans le cas où seules les interactions dislocation-dislocation sont prises en compte, il est généralement admis que la contrainte d'écoulement à zéro Kelvin est donnée par la formule de Taylor que l'on rappel ici :

$$\hat{\sigma} = \alpha bMG\sqrt{\rho} \qquad (3.1.1)$$

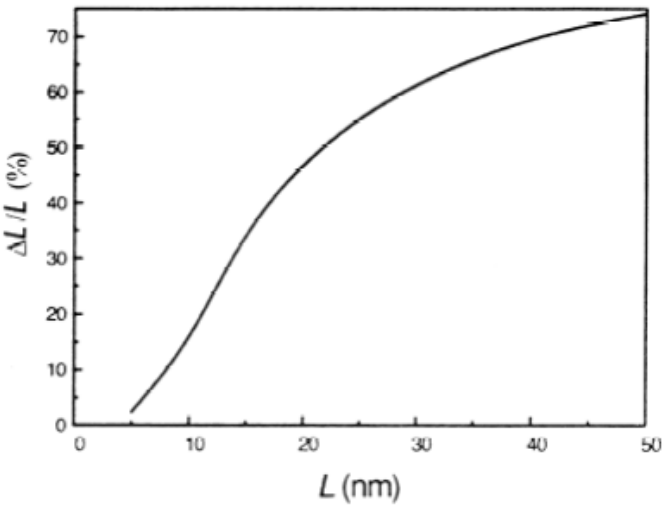
Ainsi, suite à une augmentation de la densité de dislocations immobiles, la contrainte critique augmente, ce qui engendre l'écrouissage. Les dislocations peuvent être produites par différentes sources, telles que les joints de grains et les sources de Frank et Read. Traitons tout d'abord de ces dernières, si l'on applique une contrainte supérieure à la contrainte limite de création de dislocations sur une source de Frank et Read, que l'on peut se représenter d'une manière simple comme une boucle de dislocation ancrée en deux points différents du cristal, la source de dislocation devient alors active et produit des dislocations. La contrainte critique d'émission de dislocation est généralement donnée par le modèle de ligne en tension (de l'anglais « line tension ») comme suit :

$$\tau_c = \frac{\mu \cdot b}{L} \qquad (3.1.2)$$

Où μ représente le module de cisaillement, b dénote la norme du vecteur de Burger et L est la longueur de la source de dislocation. Ainsi, en diminuant la taille de grains, les sources de Frank et Read seront confinées. Plus précisément, on peut aisément concevoir que la longueur de la source sera réduite avec la taille de grain. Dans le cas limite, la source de Frank et Read ne peut excéder la taille de grain. La diminution de la longueur de la source engendre une augmentation de sa contrainte critique d'activation. On s'attend donc à ce que l'activité des dislocations soit moindre avec une diminution de la taille de grain (à contrainte appliquée équivalente).

La diminution de l'activité des dislocations peut aussi être rationalisée en terme d'énergies. Qin et al. (Qin et al. 1999b), proposent un modèle traitant de la stabilité des dislocations dans les matériaux. Le raisonnement suivi est simple et basé sur les champs de contraintes, localisés au niveau des joints de grains, engendrés par l'expansion de volume relatif locale du matériau (comparativement au volume d'un cristal parfait) mesurée expérimentalement sur des échantillons produits par différents procédés (Van Petegem et al. 2003). A l'équilibre, les contraintes appliquées par les joints de grains sont égales aux contraintes de Peierls, on démontre alors qu'en diminuant la taille de grains, le rapport de la surface où une dislocation peut être à l'équilibre sur la surface totale diminue (Qin et al. 2002) (voir Figure III-1).

Dans la conceptualisation de Qin et al. (Qin et al. 1999a), le module d'élasticité volumique, qui dépend de l'excès de volume, diminue avec la taille de grain. Dans les matériaux conventionnels, les joints de grains ont un rôle connu de barrière au mouvement des dislocations, le nombre de dislocations pouvant s'empiler au niveau du joint de grain dépend de la résistance du joint de grain. Ainsi, puisque la résistance des joints de grains diminue suite à l'augmentation de l'excès de volume du joint de grain, ces derniers constituent alors des barrières moins efficaces à l'empilement des dislocations et pourraient même agir comme puits de dislocations.



(Qin et al. 2002)

Figure III-1: Rapport de la longueur de stabilité d'une dislocation sur la taille de grain en fonction de la taille de grains

Discutons désormais de l'effet de taille dans l'activité des sources de dislocations intergranulaires. Dans les matériaux conventionnels à structure C.F.C, l'empilement de dislocations localisées dans la proximité des joints de grains exerce des contraintes relativement importantes sur les joints de grains, ce qui à pour effet de limiter l'émission de dislocations par les sources intergranulaires. Comme précisé ci-dessus, dans le domaine UF et NC, la densité de dislocations stockées dans les cristaux diminue, ce qui engendre des contraintes de plus faible amplitude sur les joints de grains, ainsi les sources de dislocations intergranulaires devraient émettre plus de dislocations dans les cristaux. De plus, étant donné que dans le domaine NC, une boucle de dislocation à une probabilité plus faible de se stabiliser à l'intérieur des cristaux, cette dernière une fois émise devrait alors finir sa course dans le joint de grain opposé à sa source. L'émission de dislocations par les joints de grains comme leur pénétration génère un transfert de masse dans les joints de grains pouvant s'opérer par mouvements de lacunes où par des montées de dislocations. Ces dernières sont le plus souvent accommodées par des mouvements de lacunes et peuvent engendrer de faibles rotations des cristaux. Notons que la rotation de cristaux a été observée dans les travaux de Ke et al. (Ke et al. 1995).

Le mécanisme d'émission de dislocations, au même titre que les mécanismes de diffusion de lacunes, pourrait être responsable du comportement dit anormal des matériaux NC. Ce qui fut d'ailleurs déjà supposé dans les travaux de DM réalisé par l'équipe de Van Swygenhoven (Derlet et al. 2002).

B. Carte de déformation

Aux vues de l'état de l'art et de la discussion présentée ci-dessus, de nombreux enseignements peuvent être tirés afin d'identifier les issues critiques nécessitant un effort de modélisation. Afin d'établir une première carte des mécanismes de déformation, qui sera évaluée dans ce travail de thèse, rappelons brièvement les informations et discussions présentés ci-dessus.

Dans les matériaux conventionnels la déformation plastique s'opère par le glissement de dislocations sur les systèmes de glissement actifs et leurs interactions avec les dislocations stockées et les joints de grains, qui jouent alors un rôle passif de barrière au mouvement des dislocations.

Une diminution de la taille de grain vers le domaine UF et NC engendre un changement du rôle des joints de grains et lignes triples qui peuvent alors émettre des dislocations dans les cœurs de grains. Ceci est résulte du fait que la densité de dislocation stockées diminue et que l'excès volumique des joints de grains est plus conséquent. Trois type de sources intergranulaires ont été identifiées : (1) les joints de grains à faibles angles d'inclinaison, (2) les joints de grains à grands angles d'inclinaison, dont la modélisation s'opère préférentiellement par le biais de dipôle de désinclinaisons et, (3) les « ledges ». En se basant sur les mesures expérimentales sur les distributions des types de joints de grains (Kumar et al. 2003; Iwasaki et al. 2004), nous pouvons dès à présent conclure que les joints de grains à faible degré d'inclinaison constituent une source de dislocations négligeable.

Le mécanisme d'émission de dislocations bien qu'introduit théoriquement il y a plus de 50 ans est toujours au cœur du débat et nécessite le développement d'un modèle permettant de décrire son effet à l'échelle macroscopique.

Bien que l'effet des macles n'ait pas été détaillé ci-dessus, leur présence et leurs effets sont eux aussi sujets à débats. Notamment les simulations de DM sur de polycristaux d'Al de 45 nm de taille de grains qui révèlent l'activité de macles dans les matériaux NC. Cependant, et bien que la présence de macles soit souvent observée dans les échantillons (Kumar et al. 2003), les résultats de DM doivent être analysés avec le plus grand soin. Tout d'abord, le maclage est typiquement observé à de très forts taux de déformations et demeure négligeable dans les matériaux à haute énergies des défauts d'empilement tel que l'Aluminium (Karaman et al. 2000). Ainsi, les résultats de DM pourraient ne pas être représentatifs dans le régime quasi statique. De plus, il fut récemment démontré que l'activité des macles peut résulter de simplifications géométriques de modélisation. En effet, les simulation 2-D columnaires révèlent la création et le mouvement de macles alors que les modélisation 3-D ne prédisent l'activité des macles uniquement dans le cas où ces dernières sont introduites initialement dans le modèle (Froseth et al. 2004).

Les mécanismes de diffusion de lacunes ont été et sont encore sujets à discussions. En effet de nombreuses expériences de fluage à température ambiante ont reporté des taux de fluages proches de ceux

prédits par l'équation du fluage de Coble. Toutefois, il fut aussi suggéré que les taux de déformation en fluage reportés soient dus à un endommagement prématuré du matériau engendré par la présence de fissures dans les échantillons. Notons aussi que le modèle de Kim et al. (Kim et al., 2000) démonte que la contribution du mécanisme de fluage de Nabarro Herring est négligeable par rapport à celle du fluage de Coble.

Enfin, lorsque la taille de grain est inférieure à 10 nm, l'activité des dislocations devient nulle et les mécanismes de mouvement de corps solide des grains par glissement des joints de grain et rotation, qui furent observé expérimentalement, sont supposés avoir une grande influence sur le comportement plastique.

Rappelons que ces mécanismes sont connus dans le cas de la superplasticité. Il pourrait donc exister un parallèle intéressant entre superplasticité et phénomènes de « confinements » dus aux très petites tailles de grains. Le débat subsiste encore quant à la possible accommodation des mouvements de corps solide des grains par des mécanismes de diffusion. Rappelons pour l'exemple la discorde entre les simulations de DM de Van Swygenhoven et al. (Van Swygenhoven et al. 1997) qui suggèrent une accommodation par diffusion de lacunes et les résultats expérimentaux de Kumar qui observa la création et croissance de fissures aux lignes triples suite au glissement des joints de grains (Kumar et al. 2003).

Ainsi il est désormais possible d'établir une première carte des mécanismes de déformation (voir Figure III-2). Nous investiguerons donc l'effet de la diffusion de lacunes au travers des joints de grains, l'effet du glissement des joints de grains et enfin nous proposerons une modélisation de l'effet de l'émission de dislocations par les joints de grains et une possibilité d'extension de ce modèle dans le cadre des développements de plasticité cristalline.

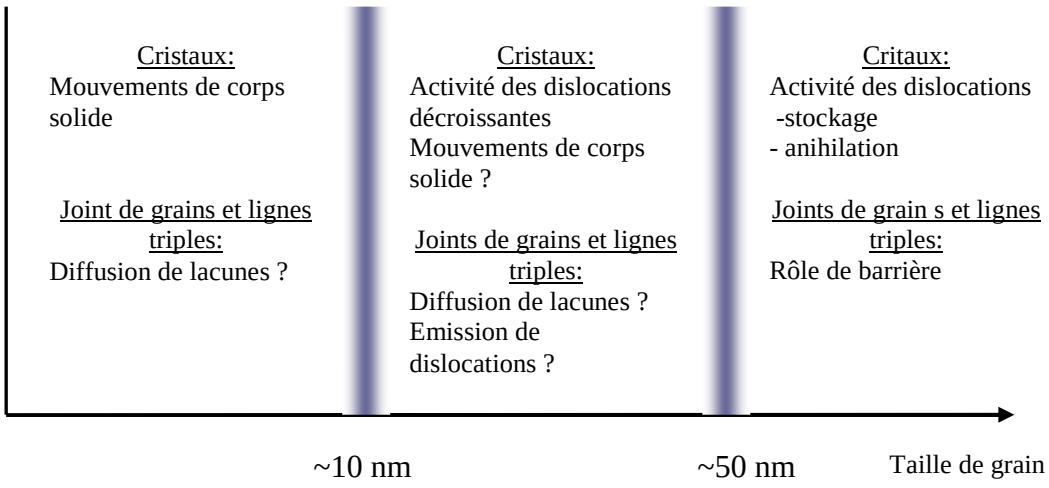


Figure III-2: Carte de déformation

Réferences partielles:

Derlet, P. M. and H. Van Swygenhoven (2002). "length scale effects in the simulation of deformation properties of nanocrystalline metals." Scripta materialia **47**: 719-724.

Froseth, A., H. Van Swygenhoven, et al. (2004). "The influence of twins on the mechanical properties of nc-Al." Acta materialia **52**: 2259-2268.

Iwasaki, H., K. Higashi, et al. (2004). "Tensile deformation and microstructure of a nanocrystalline Ni-W alloy produced by electrodeposition." Scripta materialia **50**: 395-399.

Karaman, I., H. Sehitoglu, et al. (2000). "Modeling the deformation behavior of Hadfield steel single and polycrystals due to twinning and slip." Acta materialia **48**: 2031-2047.

Ke, M., S. A. Hackney, et al. (1995). "Observations and measurement of grain rotation and plastic strain in nanostructured metal thin films." Nanostructured materials **5**: 689-697.

Kumar, K. S., S. Suresh, et al. (2003). "Deformation of electrodeposited nanocrystalline nickel." Acta materialia **51**: 387-405.

Qin, W., Z. Chen, et al. (1999a). "Dislocation pileups in nanocrusyalline materials." Journal of alloys and compounds **289**: 285-288.

Qin, W., Z. H. Chen, et al. (1999b). "Crystal lattice expansion of nanocrystalline materials." Journal of Alloys and Compounds **292**: 230-232.

Qin, W., Y. W. Du, et al. (2002). "Dislocation stability and configuration in the crystallites of nanocrystalline materials." Journal of alloys and compounds **337**: 168-171.

Van Petegem, F. Dalla Torre, et al. (2003). "Free volume in nanostructured Ni." Scripta materialia **48**: 17-22.

Van Swygenhoven, H. and A. Caro (1997). "Molecular dynamics computer simulation of nanophase Ni: structure and mechanical properties." Nanostructured materials **9**: 669-672.

Chapitre IV. Effet des mécanismes de diffusion

Dans ce chapitre nous développons un modèle permettant d'évaluer dans un premier temps l'effet du mécanisme de fluage de Coble et dans un second temps l'effet combiné du fluage de Coble et du glissement de Lifschitz. Ce dernier correspond au glissement des joints de grains accommodé par la diffusion de lacune le long des interfaces grain/joint de grain. Rappelons ici qu'il ne s'agit que d'une première approche qui est basée sur les travaux disponibles dans la littérature au début de ce projet de recherche. Ainsi, cette première étape à pour objectifs de valider le choix de la topologie représentative du matériau et de quantifier l'effet que la diffusion pourrait avoir sur le comportement des matériaux UF et NC.

A. Effet de la diffusion de Coble

Cette section est dédiée à l'étude de l'effet des phénomènes de diffusion sur le comportement des matériaux UF et NC (Capolungo et al. 2004; Capolungo et al. 2005).

La première problématique nécessitant réflexion est celle de la description de la topologie du matériau. En considérant le fait que les joints de grains et lignes triples ont une structures nettement distincte de celles des cœurs de grains et le fait que la fraction volumique de joints de grains devient non négligeable à partir d'une taille de grain de ~100 nm alors que la fraction volumique de lignes triple reste négligeable pour des tailles de grains supérieures à 10 nm, nous choisissons de représenter le matériau de manière équivalente comme un composite à deux phases, où la phase inclusionnaire représente les cœurs de grains (cristaux) et la phase matrice représente les joints de grains et lignes triples (voir Figure IV-1).

Le comportement des cœurs de grains est dominé par deux mécanismes de déformation plastique actif: le glissement des dislocations et le mécanisme de diffusion de Coble. Nous choisissons d'ignorer la contribution du mécanisme de fluage de Nabarro Herring car le modèle de Kim et al. (Kim et al. 2001) démontre que sa contribution est négligeable comparativement à celle du fluage de Coble. Le comportement de la phase matrice est considéré élastique plastique parfait. Nous développerons une loi de comportement décrivant le comportement des joints de grains dans un prochain chapitre. Le modèle est limité au cas d'inclusions sphériques, on suppose qu'aucun glissement entre inclusions et matrice n'est possible. Enfin, on se limite au cas isotropique incompressible. La transition d'échelle est réalisée à l'aide d'un micromécanique simple de type Kroner, présenté dans l'annexe consacrée à la transition d'échelle

(Cherkaoui et al. 2000)). Le modèle est appliqué au cas du Cuivre, matériau pour lequel le plus de données expérimentales sont disponibles, et les prédictions du modèle en régime quasi statique à température ambiante seront comparées aux résultats expérimentaux disponibles dans la littérature.

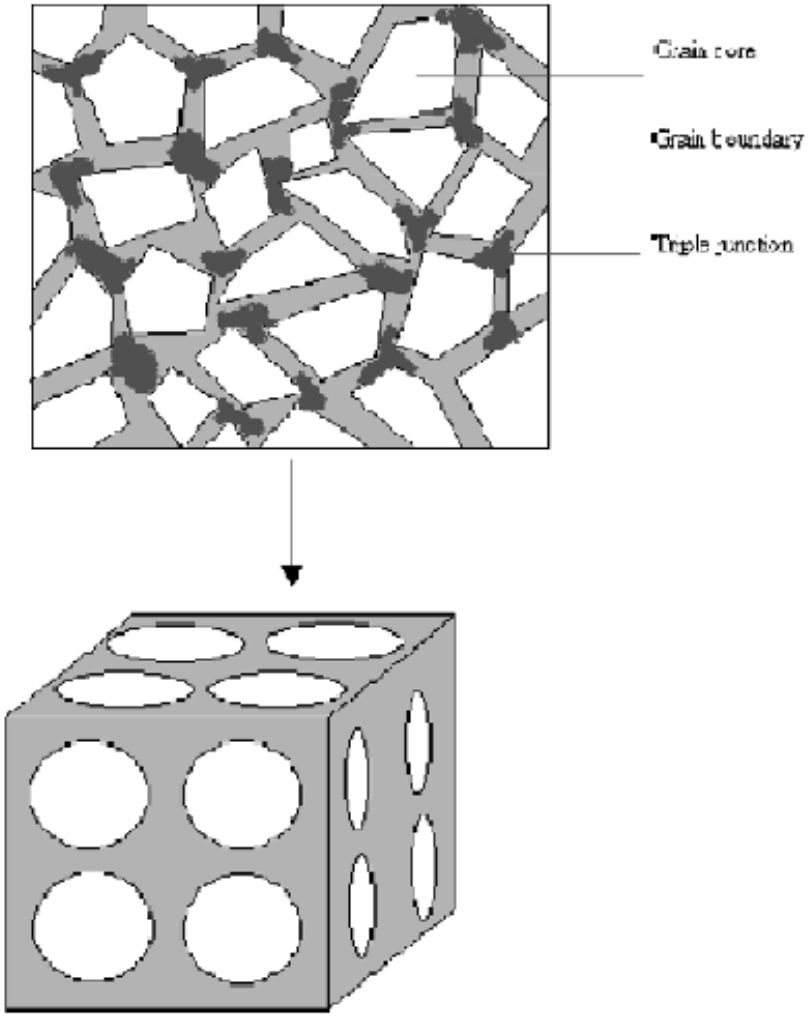


Figure IV-1: Matériau équivalent

Dans ce chapitre, les exposants I et M référeront respectivement aux phases inclusionnaire et matrice. ε, σ et $\dot{\varepsilon}, \dot{\sigma}$ dénoteront, respectivement, les tenseurs de deuxième ordre de déformations et de contraintes ainsi que leur taux. Σ, E représenteront les tenseurs de contraintes globales et des déformations globales. Enfin, afin de présenter un développement le plus général possible, les développements mathématiques seront présentés sous forme tensorielle dans le cas tridimensionnel bien que l'application numérique du modèle ait été réalisée dans le cas simple unidimensionnel. Les développements du modèle sont présentés dans l'annexe du chapitre.

1. Comportement des inclusions

La phase inclusionnaire se déforme plastiquement par le glissement des dislocations, dont l'expression est basée sur les travaux de Estrin et de Kim et al. (Estrin 1998; Kim et al. 2000; Kim et al. 2001), et par le mécanisme de fluage de Coble présenté dans le chapitre dédié à l'état de l'art. On suppose donc que la phase inclusion est composée des cristaux et d'une interface dans laquelle la diffusion de lacune prendra place. Etant donné le caractère visqueux des mécanismes de diffusion et des mécanismes de glissement de dislocation, la loi de comportement s'écrit comme suit :

$$\dot{\sigma}^I = \boldsymbol{C}^I : \left(\dot{\varepsilon}^I - \dot{\varepsilon}^{vpI}\right) \tag{4.1.1}$$

Ici $\dot{\varepsilon}^{vpI}$ représente le tenseur des taux de déformations viscoplastique et $\boldsymbol{C}^I$ est le tenseur de quatrième ordre des modules élastiques. Considérant le caractère isotropique de la déformation plastique, l'écoulement plastique est décrit par une loi de Prandtl Reuss définie comme suit :

$$\dot{\varepsilon}^{\boldsymbol{vpI}} = \frac{3}{2}\frac{\dot{\varepsilon}_{eq}^{vpI}}{\sigma_{eq}^I}\sigma_{dev}^I \tag{4.1.2}$$

Où $\dot{\varepsilon}_{eq}^{vpI}$, σ_{dev}^I et σ_{eq}^I dénotent respectivement le taux de déformation viscoplastique équivalent, la partie déviatorique du tenseur des contraintes, et la contrainte équivalente de Von Mises: $\sigma_{eq}^I = \sqrt{\frac{3}{2}\sigma_{dev}^I : \sigma_{dev}^I}$. Le taux de déformation viscoplastique équivalent, décrivant les effets des mécanismes de déformation plastique, tient compte des effets du glissement des dislocations, dénoté par l'exposant *'dis'*, et de la diffusion de lacunes, dénoté par l'exposant *'co,'* et s'écrit donc comme la somme des contributions des deux mécanismes supposés actifs :

$$\dot{\varepsilon}_{eq}^{vpI} = \dot{\varepsilon}^{dis} + \dot{\varepsilon}^{co} \tag{4.1.3}$$

Le formalisme utilisé par Kim et al. est utilisé pour décrire le mécanisme de diffusion, ainsi on décrit le mécanisme thermiquement activé de glissement de dislocations par une loi puissance comme suit (Estrin 1998; Kim et al. 2000; Kim et al. 2001) :

$$\dot{\varepsilon}^{dis} = \dot{\varepsilon}^* \left(\frac{\sigma_{eq}^I}{\sigma_0}\right)^m \rho^{-m/2} \tag{4.1.4}$$

Ici $\dot{\varepsilon}^*, \sigma_0, m, \rho$ représentent respectivement, une constante numérique, un terme relatant de l'effet de la microstructure sur le glissement des dislocations, l'exposant d'écrouissage et la densité de dislocations sessiles normalisée par rapport à la densité de dislocations initiale. On notera que, dans un souci de simplicité, on ne différencie pas les dislocations géométriquement nécessaires des dislocations statistiquement stockées (on ne considère donc pas les effets du gradient de déformation). L'évolution de la densité de dislocations immobiles avec l'état de déformation est donné par:

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon^{dis}} = C + C_1\sqrt{\rho} - C_2\rho \qquad (4.1.5)$$

On notera que l'expression (4.1.5) se base sur les travaux de Estrin (Estrin et al. 1984), et tient donc compte du stockage des dislocations dû à la présence de joints et aux dislocations stockées. Le mécanisme de recouvrement dynamique par annihilation de dislocations est décrit par le troisième terme de (4.1.5). Ainsi C_1 est une constante numérique, et C s'écrit comme suit:

$$C = M \cdot \frac{b}{d}\left(\frac{M \cdot \alpha \cdot G}{\sigma_0}\right)^2 \qquad (4.1.6)$$

Ici M, b, G représentent respectivement le facteur de Taylor tenant compte de la nature polycristalline du matériau, la norme du vecteur de Burger et le module de cisaillement. α est une constante numérique décrivant l'interaction des dislocations. Le mécanisme d'annihilation des dislocations est thermiquement activé et se présente comme suit :

$$C_2 = C_{20}\left(\frac{\dot{\varepsilon}^{dis}}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{-1/n} \qquad (4.1.7)$$

Dans l'expression (4.1.7) , C_{20} et $\dot{\varepsilon}_0$ sont des constantes numériques. Comme il le sera démontré dans le chapitre dédié à l'effet de la l'émission de dislocations, le rapport de C_{20} et C_1 détermine à une taille de grain donnée la valeur de la contrainte de saturation. Les exposants m et n tiennent compte de la nature thermiquement activée des mécanismes de glissement et d'annihilation de dislocations, et par conséquent sont inversement proportionnels à la température. On remarquera qu'une description des mécanismes thermiquement activés par une expression exponentielle serait toutefois plus précise.

Enfin, l'expression de l'effet de la diffusion des lacunes est décrite par l'équation du fluage de Coble (Coble 1963) donnée par:

$$\dot{\varepsilon}^{co} = \frac{14 \cdot \pi \cdot \Omega_c \cdot w \cdot D_{bd}^{sd} \cdot \sigma_{eq}^{I}}{k \cdot T \cdot d^3} \qquad (4.1.8)$$

Ici T représente la température, k est la constante de Boltzmann, d est la taille de grains, Ω_c est le volume atomique et D_{bd}^{sd} est le coefficient d'autodiffusion des joints de grains.

2. Comportement de la phase matrice

Décrivons désormais le comportement de la phase matrice et rappelons toutefois ici que ce modèle n'est qu'une première approche visant à évaluer la performance des techniques d'homogénéisation dans le cas des matériaux NC et à traiter l'effet des mécanismes de diffusion. Ainsi, bien que les joints de grains ne puissent en aucun cas être considérés comme ayant une structure de type «gaz», où aucune régularité dans l'organisation des atomes ne peut être observée, nous supposerons, dans un premier temps, les joints de grains amorphes. Il est communément accepté que la contrainte d'écoulement des matériaux amorphes prend des valeurs variant entre 50 et 70% de son module d'Young. Les valeurs expérimentales reportées varient entre 60 et 75% du module d'Young d'un cristal parfait de même composition. Ici, nous limiterons la contrainte d'écoulement à une valeur de 800 MPa. Lorsque la contrainte équivalente de Von Mises est inférieure à la contrainte d'écoulement, la phase matrice est gouvernée par simple loi linéaire élastique donnée par :

$$\dot{\sigma}^M = \boldsymbol{C}^M : \dot{\varepsilon}^M \qquad (4.1.9)$$

Avec $\boldsymbol{C}^M$, le tenseur de quatrième ordre des modules d'élasticité.

3. Le matériau effectif

Le comportement global du matériau est extrait des comportements locaux des constituants à l'aide du schéma autocohérent développé par Cherkaoui et al. (Cherkaoui et al. 2000). Dans ce cas nous raisonnons sur un matériau équivalent composé d'une phase inclusion et d'une phase matrice (voir Figure IV-1). Le fait d'inclure la participation des lignes triples dans la fraction volumique de la phase matrice ne peut nuire à la qualité des prédictions que lorsque la taille de grain est inférieure à ~10 nm. En effet, comme précisé dans l'état de l'art, la fraction volumique des lignes triples ne devient non négligeable que lorsque la taille de grain est inférieure à ~10 nm. En considérant la nature élasto-viscoplastique du comportement des

inclusions, on peut alors supposer que le comportement effectif du matériau est lui aussi élasto-viscoplastique :

$$\dot{\Sigma} = \boldsymbol{C}^{eff} : \left(\dot{E} - \dot{E}^{vp} \right) \qquad (4.1.10)$$

Ici, C_{ijkl}^{eff} est le tenseur de quatrième ordre des modules élastiques. On obtient les composantes de ce dernier à partir du schéma autocohérant d'Eshelby. Avec le schéma autocohérant de Cherkaoui et al., les relations de concentration sont données par:

$$\dot{\varepsilon}^{r} = \boldsymbol{A}^{r} : \dot{E} + a^{r} \qquad \text{avec r=I,M} \qquad (4.1.11)$$

Dans les relations (4.1.11) , les tenseurs de concentrations de quatrième ordre, dénotés A^r , décrivent l'effet de l'hétérogénéité des comportements élastiques, alors que les tenseurs de second ordre, dénotés a^r décrivent quant à eux l'hétérogénéité des comportement inélastiques. Grâce au schéma d'homogénéisation on obtient les expressions suivantes des tenseurs de second et de quatrième ordre de localisation. :

$$\boldsymbol{A}^{r} = \left[\boldsymbol{I} + \boldsymbol{S}^{E} : \left(\boldsymbol{C}^{eff} \right)^{-1} : \left(\boldsymbol{C}^{r} - \boldsymbol{C}^{eff} \right) \right]^{-1} \qquad \text{avec r=I,M} \qquad (4.1.12)$$

$$a^{I} = \boldsymbol{A}^{I} : \boldsymbol{S}^{E} : \left(\boldsymbol{C}^{eff} \right)^{-1} : \left(\boldsymbol{C}^{eff} : \dot{\varepsilon}^{vpI} - \boldsymbol{C}^{eff} : \dot{E}^{vp} \right) \qquad (4.1.13)$$

$$a^{I} = -\boldsymbol{A}^{M} : \boldsymbol{S}^{E} : \dot{E}^{vp} \qquad (4.1.14)$$

Dans les relations précédentes, S^E dénote le tenseur d'Eshelby. Enfin le tenseur des taux de déformation viscoplastiques effectif est donné par:

$$\dot{E}^{vp} = f \cdot \left(\boldsymbol{C}^{eff} \right)^{-1} : \boldsymbol{A}^{I} : \boldsymbol{C}^{I} : \dot{\varepsilon}^{vpI} \qquad (4.1.15)$$

4. *Résultats*

Le modèle présenté ci-dessus est appliqué au cas du cuivre sous traction uni axiale en régime quasi statique. Les tailles de grains simulées varient entre plusieurs microns et 10 nm. L'effet du taux de déformation est étudié en simulant trois taux de déformations différent: 1.E-5/s, 1.E-4/s, et 1.E-3/s.

a) Evaluation des constantes

Les constantes numériques utilisées sont les suivantes :

$C_{20} = 18.5, \mu_I = 42100$ MPa., $\mu_M = 25260$ MPa., σ_0=160 MPa. , $\Omega_c = 1.18E^{-29}, m = 230, n = 12.25$

, $b = .246$ nm, $k = 1.38E^{-23}$ $M = 3.06, \alpha = .33, T = 300K, G = 42100$MPa .

Le module de cisaillement de la phase inclusionnaire est celui du Cuivre conventionnel. En effet, dans le cas limite d'une taille de grains infinie, la fraction volumique de la phase matrice devient nulle et le comportement du matériau est exclusivement donné par le comportement de la phase inclusionnaire. Le module de cisaillement de la phase matrice est évalué à 60% du module de cisaillement de la phase inclusionnaire. Les paramètres σ_0 et n sont évalués de sorte à obtenir une précision optimale des résultats. Remarquons que le paramètre σ_0 dépend de la densité initiale de dislocations, donnée que l'on ne connaît pas à priori, et il influence par conséquent le seuil initial de plasticité. Les autres données numériques sont extraites des travaux de Kim et al. (Kim et al. 2000; Kim et al. 2001).

b) Comportement des inclusions

Cette section traite du comportement de la phase inclusionnaire. Nous y étudierons notamment l'effet de l'évolution de la contribution relative des deux mécanismes de déformations, l'effet de taille et l'effet du taux de déformation macroscopique imposé.

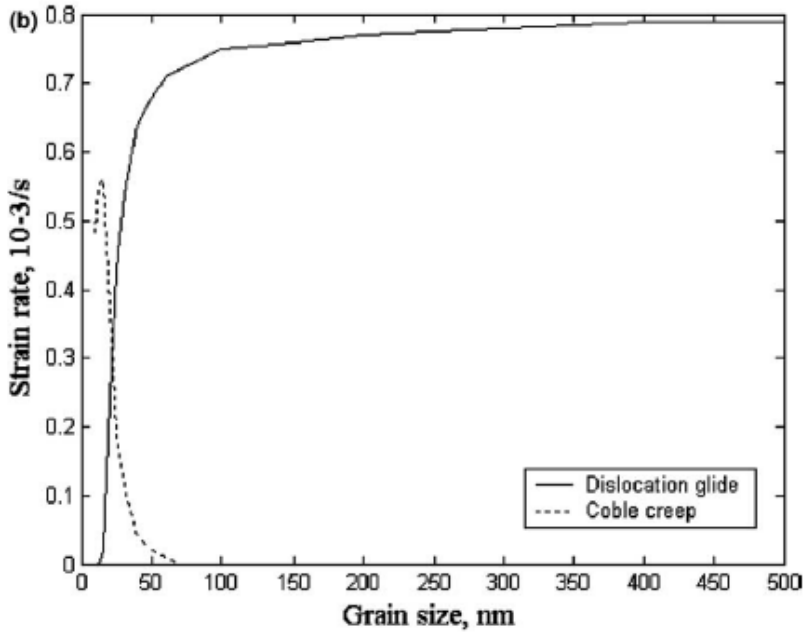
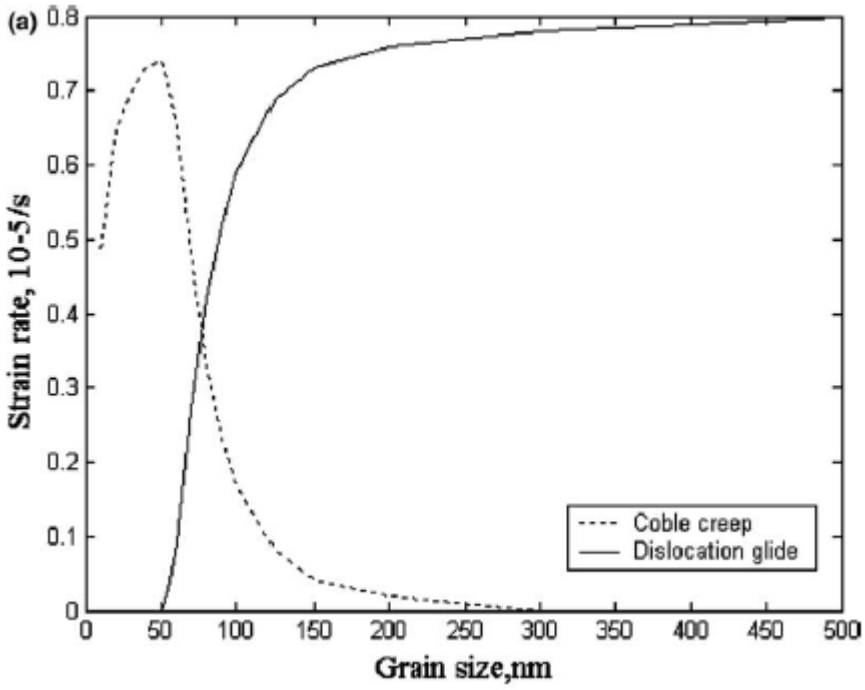


Figure IV-2 présente les taux de déformation viscoplastiques équivalent des mécanismes de diffusion de Coble et de glissement des dislocations en fonction de la taille de grain. Dans le cas a) un taux de déformation macroscopique de 1.E-5/s est imposé au matériau, alors que dans le cas b), on impose un taux de déformation de 1.E-3/s. Dans le cas a), on observe alors que le mécanisme de glissement des dislocations domine la déformation viscoplastique du matériau ayant une taille de grain supérieure à 300 nm. La contribution du mécanisme de diffusion de Coble augmente avec une diminution da taille de grain alors que la contribution du mécanisme de glissement des dislocations diminue. Lorsque la taille de grain est inférieure à 85 nm, le mécanisme de diffusion de Coble domine le glissement des dislocations. On remarquera aussi que la contribution totale (glissement + diffusion) de la déformation plastique de la phase inclusionnaire diminue dans le régime UF.

L'évolution de la réponse de la phase inclusionnaire avec le taux de déformation macroscopique est présentée dans la Figure IV-3. Ces simulations ont été réalisées à des tailles de grains de 1000 nm. Les résultats indiquent qu'une augmentation du taux de déformation macroscopique engendre un écrouissage plus prononcé. Comme indiqué dans la discussion précédente, à une taille de grain de 1000 nm, la contribution à la déformation plastique du mécanisme de diffusion de Coble est négligeable. C'est donc le mécanisme de glissement des dislocations qui contrôle la déformation plastique de la phase inclusionnaire, ce dernier dépendant de l'évolution de la densité de dislocations stockées qui augmente avec le taux de déformation.

Enfin, l'effet de taille sur la réponse des inclusions est présenté dans la Figure IV-4, trois tailles de grain sont simulées 1000 nm, 100 nm, et 10 nm. Les simulations sont réalisées à un taux de déformation macroscopique de 1.E-3/s. Dans le cas des tailles de grains de 1000 nm et 100 nm, le matériau présente un comportement typique. Le matériau est plus écroui à une taille de grain de 100 nm, ce qui est dû à la

diminution du libre parcours moyen des dislocations engendré par la diminution de la taille de grain. Le comportement de la phase inclusionnaire, à une taille de grain de 10 nm ne présente pas d'écrouissage et est considérablement moins « dur ». A cette taille de grain le comportement viscoplastique est dominé par le mécanisme de diffusion de Coble qui engendre la réponse observée.



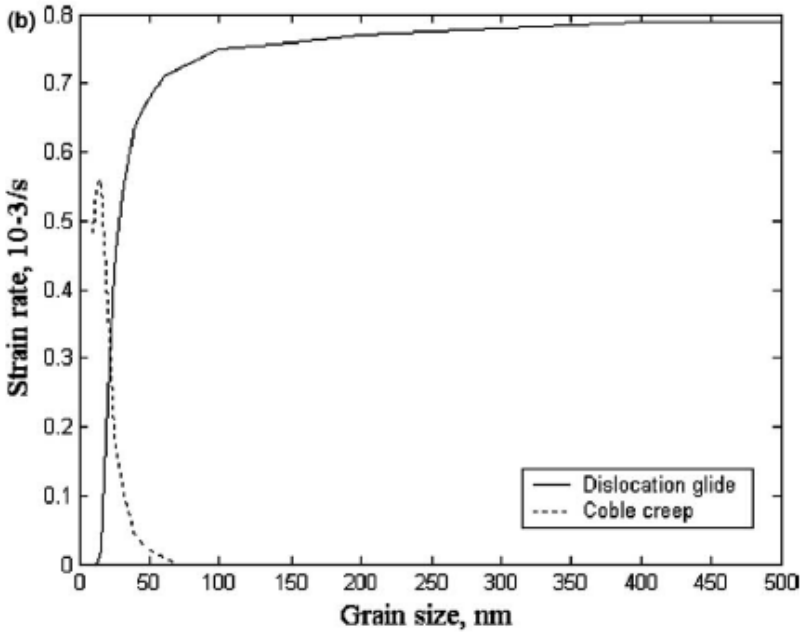


Figure IV-2: Evolution des contributions relatives des mécanismes de glissement de dislocations et de diffusion; avec des taux de déformation de 1E-5/s a) et 1.E-3/s b).

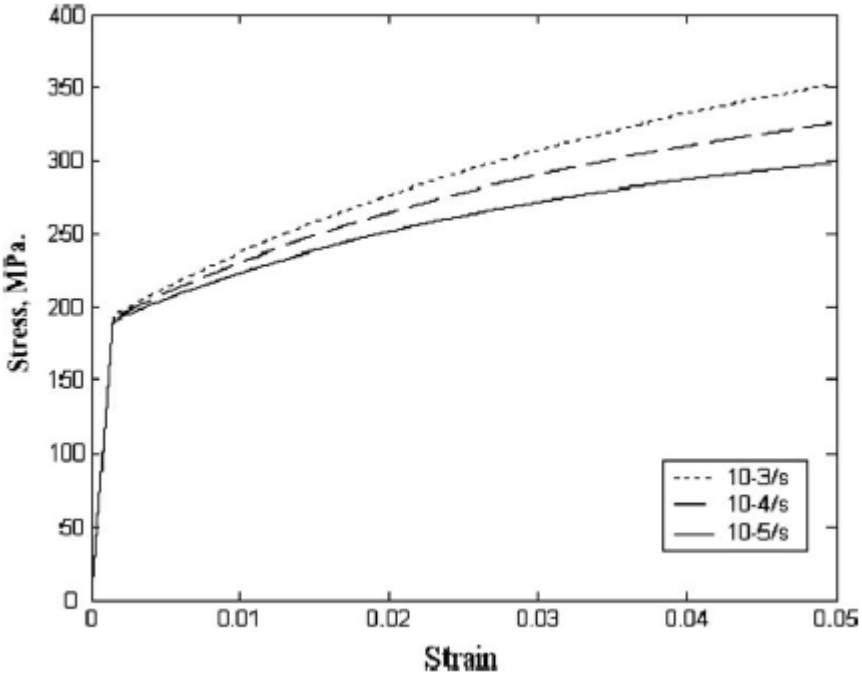


Figure IV-3: Courbes contrainte déformation de la phase inclusionnaire à 1.E-5/s, 1.E-4/s et 1.E-3/s et d=1000 nm

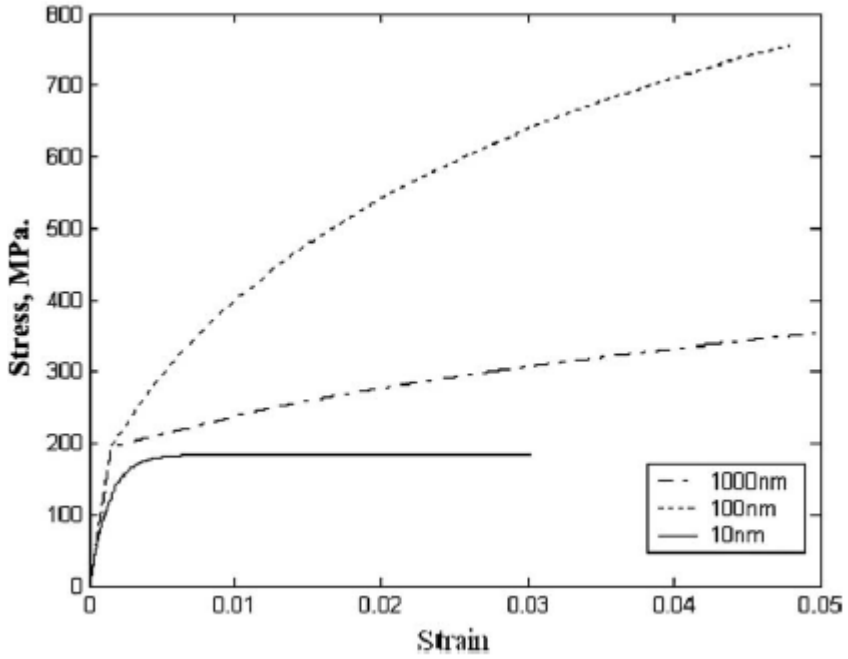


Figure IV-4: Courbes contraintes déformation de la phase inclusion à différentes tailles de grains

c) Comportement de la matrice

Traitons brièvement de la réponse de la phase matrice. Cette dernière ayant un comportement élastique plastique parfait, elle n'exhibe donc pas de dépendance au taux de déformation ni à la taille de grain, ce que l'on peut observer dans la Figure IV-5 où différentes tailles de grains et différents taux de déformation ont été simulés.

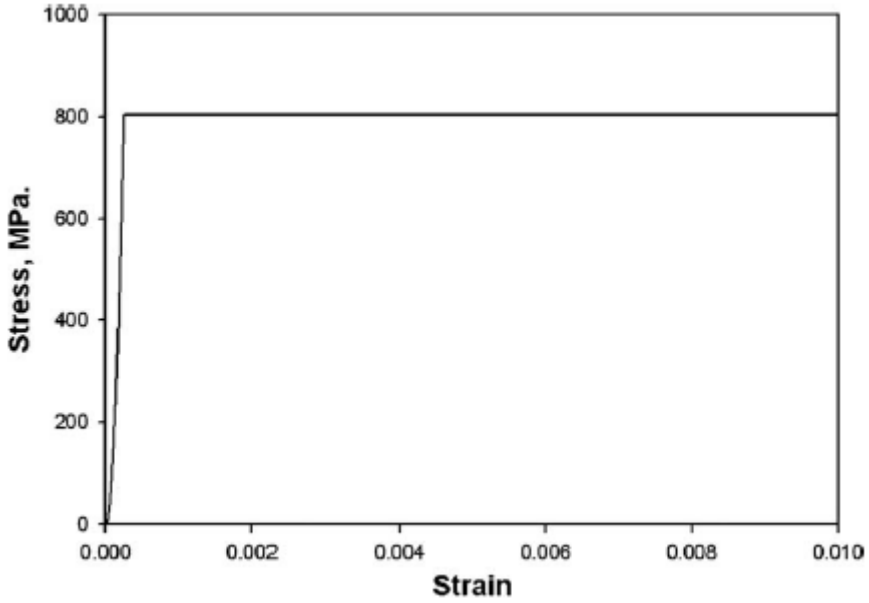


Figure IV-5: Courbe contrainte déformation de la phase matrice

d) Comportement macroscopique du matériau

La réponse du matériau en traction uni axiale à différentes tailles de grains (1000, 100 et 10 nm) et à un taux de déformation macroscopique imposé de 1.E-3/s est présentée dans la Figure IV-6. On observe que dans le cas des grandes tailles de grains (1000 et 100 nm), le matériau connaît un écrouissage plus prononcé lorsque la taille de grain est diminuée. En effet, la contribution de la phase matrice est négligeable à ces tailles de grains et le comportement macroscopique du matériau est donc semblable à celui de la phase inclusionnaire. Dans le cas où la taille de grain vaut 10 nm, les deux phases jouent un rôle non négligeable. Le comportement des inclusions est dominé par la diffusion de Coble alors que la matrice exhibe quant à elle un comportement élastique plastique parfait.

L'effet du taux de déformation sur la réponse macroscopique du matériau est présenté dans la Figure IV-7. La taille de grains prescrite dans ces simulations est de 1000 nm. Ainsi, le comportement est largement dominé par la réponse de la phase inclusionnaire qui lui-même est engendré par le mécanisme de glissement des dislocations.

Le modèle est comparé aux résultats expérimentaux (Sanders et al. 1996; Youngdahl et al. 1997) dans la Figure IV-8. Les simulations sont réalisées à un taux de déformation de 1.E-3/s. On observe alors que le modèle permet de prédire avec une précision acceptable le comportement élastique et le début de la déformation plastique dans le cas des matériaux conventionnels comme dans le cas des matériaux UF et NC. On observe cependant aussi que lorsque la déformation excède ~1%, le modèle surestime le comportement plastique du matériau, ce qui fera l'objet d'une discussion dans la conclusion de ce chapitre.

Enfin, dans la Figure IV-9, on trace l'évolution de la contrainte d'écoulement à 0.5% de déformation avec l'inverse de la racine carré de la taille de grain. La contrainte d'écoulement n'est pas une propriété intrinsèque du matériau, elle dépend notamment de la densité initiale de dislocations qui est inconnue. Le modèle permet de prédire l'évolution de la contrainte d'écoulement avec la taille de grain avec une bonne précision. On note une augmentation quasi linéaire, prédite par la loi de Hall et Petch, de la contrainte d'écoulement lorsque la taille de grain est diminuée de 400 nm à ~100 nm. Lorsque la taille de grain est plus fine, on observe une chute de la loi de Hall et Petch. La taille de grain critique à laquelle la contrainte d'écoulement commence à diminuer est dépendante du taux de déformation imposé. Une augmentation du taux de déformation entraîne une diminution de la taille de grain critique.

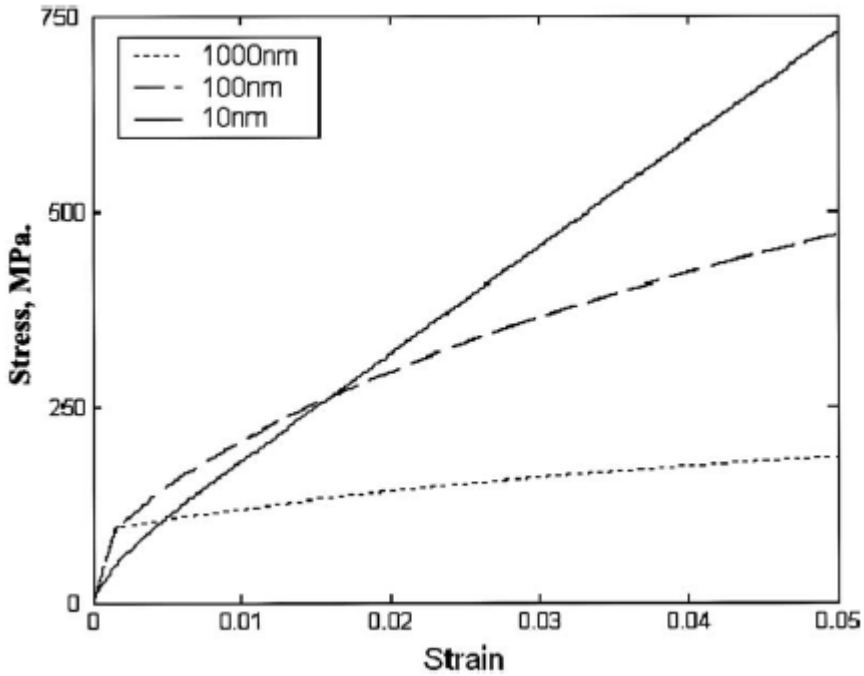


Figure IV-6: Courbes contrainte déformation de matériau à différentes tailles de grains (1000, 100 et 10 nm).

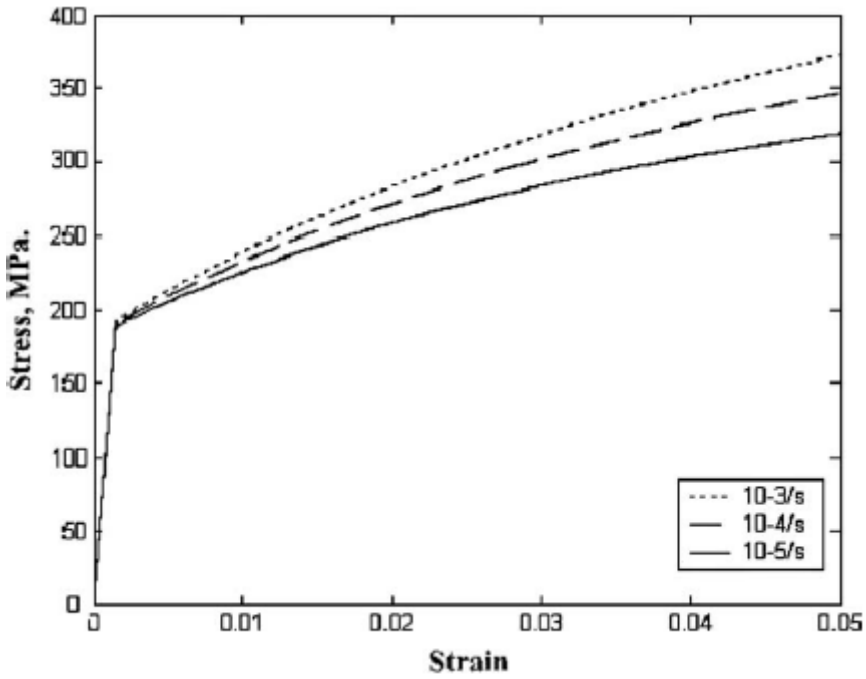


Figure IV-7: Courbes contrainte déformation du matériau global à différents taux de déformation

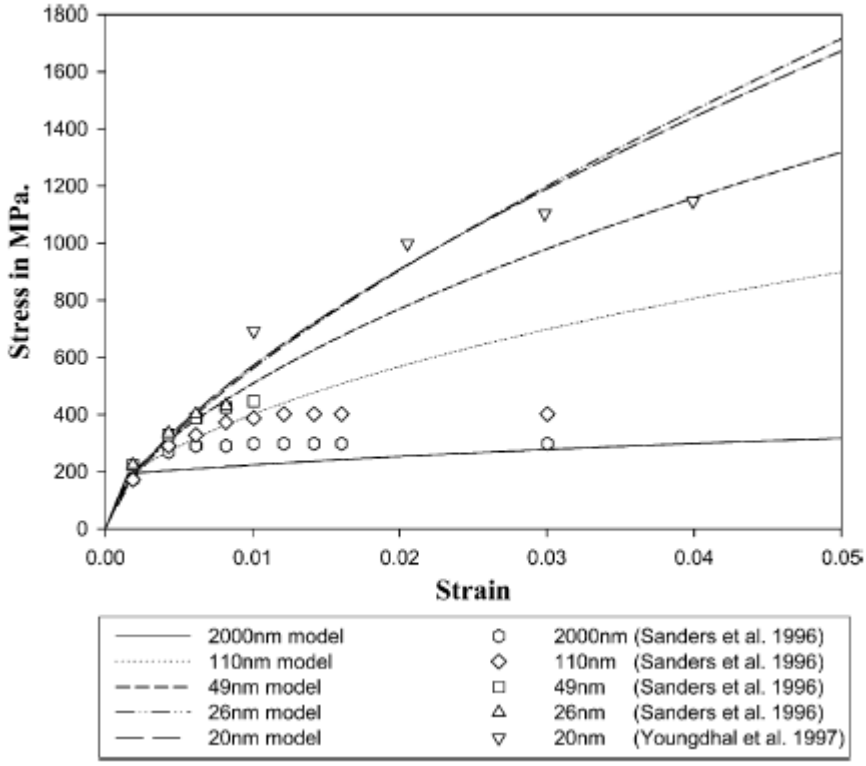


Figure IV-8: Comparaison des prédictions du modèle (courbes) avec des données expérimentales.

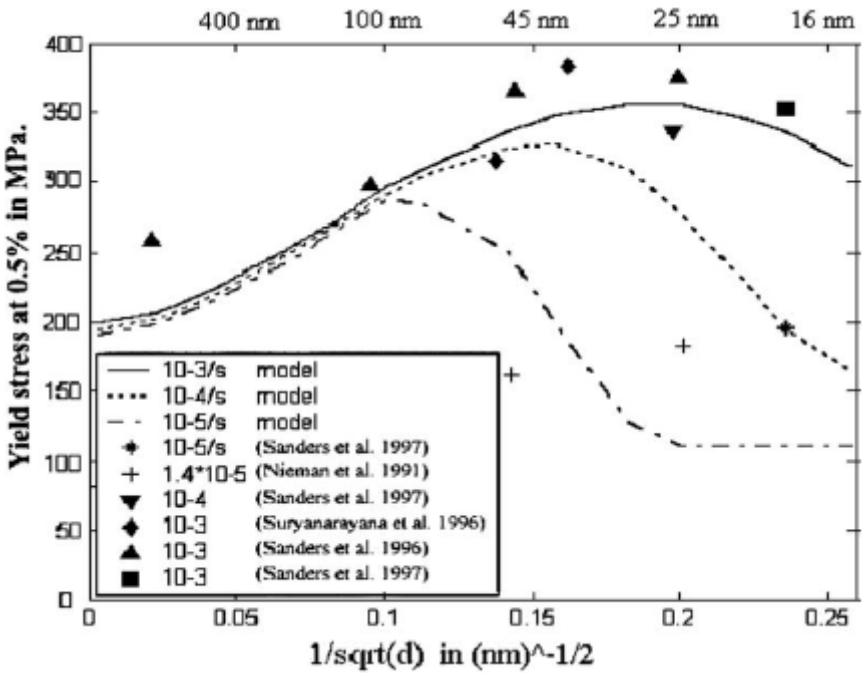


Figure IV-9: Evolution de la contrainte d'écoulement avec la taille de grain ; les résultats expérimentaux sont extrait de (Nieman et al. 1991; Sanders et al. 1996; Surayanarayana et al. 1996; Sanders et al. 1997).

e) Discussion

Le modèle développé dans ce chapitre permet de prédire avec une précision acceptable la dépendance de la contrainte d'écoulement avec la taille de grain. De surcroît, on confirme alors que la chute de la loi de hall et Petch pourrait résulter de la diffusion de lacune par les joints de grains. En comparant Figure IV-9 et

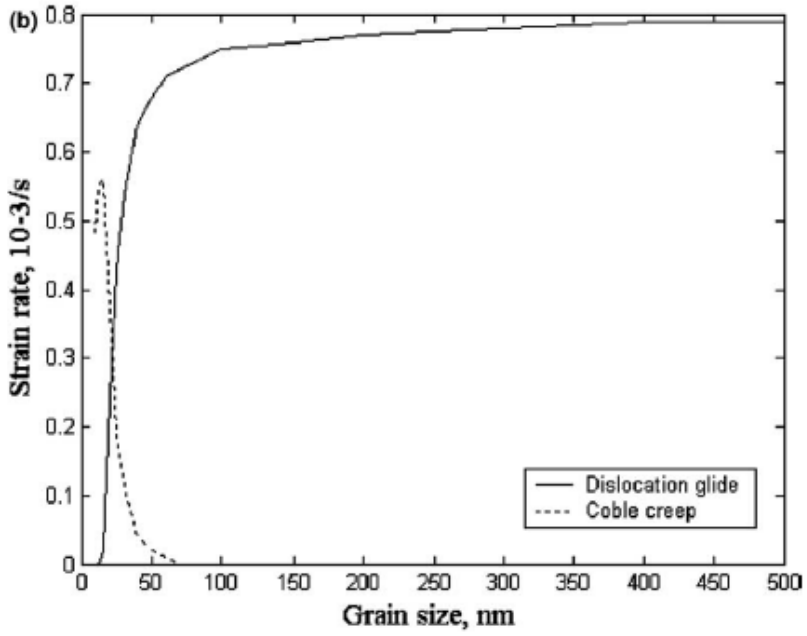


Figure IV-2, on remarque alors que la chute de la loi de Hall et Petch se produit lorsque le mécanisme de fluage de Coble domine celui de glissement des dislocations.

Toutefois le comportement plastique n'est prédit avec une grande précision lorsque la déformation plastique est supérieure à 1%. Les différences entre les comportement mesurés et les prédictions du modèle peuvent s'expliquer par les difficultés liés à la fabrication d'échantillons non poreux, à la méthode d'homogénéisation, qui comme nous l'avons montré dans le chapitre précédent, tend à surestimer le comportement plastique du matériau, au mécanisme de déformation pris en compte, car comme le montre l'état de l'art, le débat sur l'implication de mécanismes de diffusion est encore ouvert, et aux constantes décrivant le comportement de la phase inclusionnaire, données par Kim et al. Ainsi, bien que le modèle apparaisse comme performant, de nombreuses voies restent encore à explorer, ce qui fera l'objet des deux prochains modèles développés.

B. L'effet du mécanisme de glissement de Lifschitz

Comme précisé dans l'état de l'art et plus précisément dans la première carte de déformation proposée au Chapitre III, le mécanisme de glissement des joints de grains accommodé par la diffusion de lacune pourrait être opérationnel dans les matériaux NC à petite taille de grain. Ainsi, dans ce qui suit, nous proposons ici une extension du modèle présenté précédemment. Nous opérons la transition de phase avec le meme schéma autocohérant qu'utilisé précédemment. De même, on utilise un schéma numérique similaire au cas précédent et on se place dans l'hypothèse d'un matériau isotrope incompressible. Les conventions d'écriture des tenseurs des contraintes et des déformations sont à nouveau réutilisées.

La phase inclusionnaire se déforme plastiquement par le seul mécanisme de glissement des dislocations, alors que la phase matrice se déforme par le mécanisme de fluage de Coble et de glissement de Lifschitz. Ce dernier correspond au cas où le glissement des joints de grains est accommodé par des phénomènes de diffusion inter cristallins.

1. Comportement des inclusions

La description de la phase inclusion est semblable à celle utilisée dans le cas précédent à la seule différence que les phénomènes de diffusion ne sont pas supposés participer à la déformation des inclusions mais à celle de la matrice. Ainsi le comportement de la phase inclusion est élasto-viscoplastique et la loi d'écoulement est donnée par la loi de Prandtl Reuss. Le taux de déformation viscoplastique tiens uniquement compte du mécanisme de glissement des dislocations, et s'écrit ainsi:

$$\dot{\varepsilon}_{eq}^{vpI} = \dot{\varepsilon}^{dis} \tag{4.2.1}$$

2. Comportement de la phase matrice

La phase matrice se déforme ici par le glissement des joints de grains et par la diffusion de lacunes le long des joints de grains. Notons ici que ces derniers sont des mécanismes de fluage. Ainsi si leur contribution respective est présente à température ambiante, les expressions prises en compte ici devraient surestimer la contribution réelle des phénomènes de glissement et de diffusion. Le comportement de la phase matrice est donc élasto-viscoplastique et s'écrit alors :

$$\dot{\sigma}^{M} = \boldsymbol{C}^{M} : \left(\dot{\varepsilon}^{M} - \dot{\varepsilon}^{vpM} \right) \tag{4.2.2}$$

Ici C_{ijkl}^{M} est le tenseur de quatrième ordre des modules d'élasticité de la phase matrice et $\dot{\varepsilon}_{kl}^{M,VP}$ est le tenseur de second ordre des taux de déformation viscoplastiques. Ici encore, on suppose un écoulement décrit par la loi de Prandtl Reuss. Le taux de déformation viscoplastique équivalent est la somme de la contribution du mécanisme de fluage de Coble et du mécanisme de glissement de joints de grain et s'écrit comme suit:

$$\dot{\varepsilon}_{eq}^{M,VP} = \dot{\varepsilon}_{co} + \dot{\varepsilon}_{gbs} \tag{4.2.3}$$

L'expression du mécanisme de fluage de Coble est donnée par (4.1.8) , alors que l'expression du mécanisme de glissement des joints de grains est quant à lui donné par les travaux de Luthy (Luthy et al. 1979) :

$$\dot{\varepsilon}_{gbs} \approx 10^8 \frac{D_{gb}}{d^3} b \left(\frac{\sigma_{eq}^I}{E} \right)^2 \qquad (4.2.4)$$

Où E est le module d'Young de la phase inclusion E, d est la taille de grain, et D_{gb} est le coefficient de diffusion des joints de grain.

3. Comportement macroscopique du matériau

Etant donné le caractère élasto-viscoplastique des deux constituants, le comportement global du matériau est aussi élasto-viscoplastique et son expression est donnée par (4.1.10). On applique ici le schéma autocohérent développé par Cherkaoui et al. (Cherkaoui et al. 2000), les relations d'homogénéisation diffèrent légèrement du cas précédent, où seuls la diffusion de Coble et le glissement des dislocations étaient alors pris en compte, du fait de la nature visqueuse du comportement de la phase matrice. Ainsi les expressions de concentration s'écrivent toujours avec la relation (4.1.11). Cependant, dans le cas présent les tenseurs de concentrations de second ordre sont donnés par:

$$a^r = \boldsymbol{A}^r : \boldsymbol{S}^E : \left(\boldsymbol{C}^{eff}\right)^{-1} : \left(\boldsymbol{C}^{eff} : \dot{\varepsilon}^{vpr} - \boldsymbol{C}^{eff} : \dot{E}^{vp}\right) \qquad \text{avec r=I,M} \qquad (4.2.5)$$

Où S_{klmn} dénote le tenseur d'Eshelby. Le tenseurs des taux de déformation viscoplastiques globaux est lié à ses équivalents locaux par :

$$\dot{E}^{vp} = \left(\boldsymbol{C}^{eff}\right)^{-1} : \left(f \cdot \boldsymbol{A}^I : \boldsymbol{C}^I : \dot{\varepsilon}^{vpI} + (1-f) \cdot \boldsymbol{A}^M : \boldsymbol{C}^M : \dot{\varepsilon}^{vpM} \right) \qquad (4.2.6)$$

4. Résultats

Le modèle est appliqué au cas du Cuivre et les prédictions obtenues sont comparées à différents résultats expérimentaux. Les paramètres utilisés sont les suivants : $\mu_I = 21.45 GPa.$, m=230, n=8.25, $\sigma_{0,I} = 220 MPa.$, $\dot{\varepsilon}_I^* = 0.005/s$, M=3.06, $\alpha = 0.33$, G=42.1GPa., $C_1 = 52.86$, $C_{20} = 18.5$, $\dot{\varepsilon}_0 = 1/s$, $\Omega_c = 1.18e-29$, $D_{bd} = 2.6e-20$, T=300K, E=130GPa., w=1.5nm.

Dans la Figure IV-10, on observe une comparaison entre les prédictions du modèle, qui sont représentés par des lignes, et différents résultats expérimentaux, représentés par les points (Sanders et al. 1996; Youngdahl et al. 1997). Les courbes contraintes déformation ont été tracées à différentes tailles de grains (2000, 110, 49, 26 et 20 nm). Une diminution de la taille de grain engendre un comportement plus «dur» du matériau lorsque la taille de grain est supérieure à 20 nm. Nous pouvons donc supposer que lorsque la taille de grain est inférieure à 20 nm, les mécanismes de diffusion dominent le mécanisme de glissement des dislocations. Ici encore on peut remarquer que le modèle surestime le comportement macroscopique du matériau lorsque la déformation excède 1%.

Dans la Figure IV-11, on observe l'évolution de la limite d'élasticité à 0.5% de déformation avec la taille de grain. Les prédictions du modèle sont représentées par des lignes alors que les données expérimentales sont elles représentées par des points. La contrainte d'écoulement augmente linéairement jusqu'à une taille de grain critique (d~ 40 nm) en dessous de laquelle on observe une diminution de la contrainte d'écoulement avec l'inverse de la racine carrée de la taille de grain. Bien que le modèle soit capable de prédire la taille de grain critique à laquelle se produit la chute de la loi de Hall et Petch, on ne peut pas caractériser le modèle comme satisfaisant. En effet, la pente de Hall et Petch prédite est très faible en comparaison aux valeurs expérimentales et globalement le modèle sous-estime les contraintes d'écoulement. Ceci est dû au fait que dans cette approche, deux mécanismes «d'adoucissement» sont pris en compte, de plus le modèle est quelque peu redondant dans le sens où le mécanisme de Lifschitz tient déjà compte de la diffusion de lacune au travers des joints de grains.

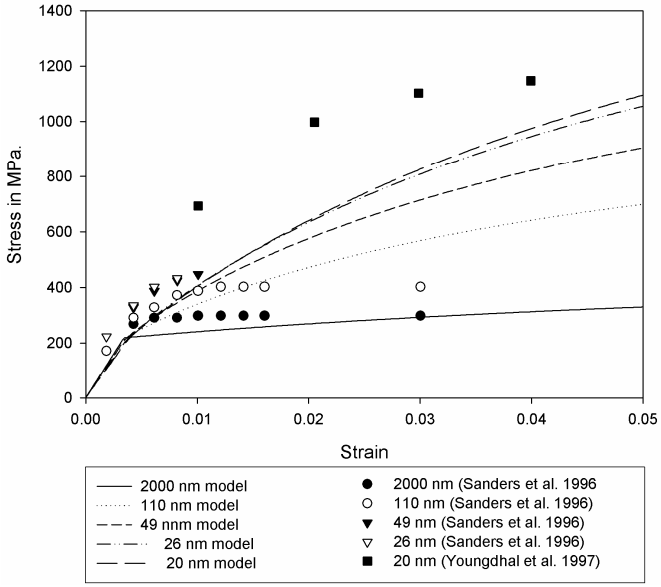


Figure IV-10: Comparaison des prédictions du modèle avec les résultats expérimentaux

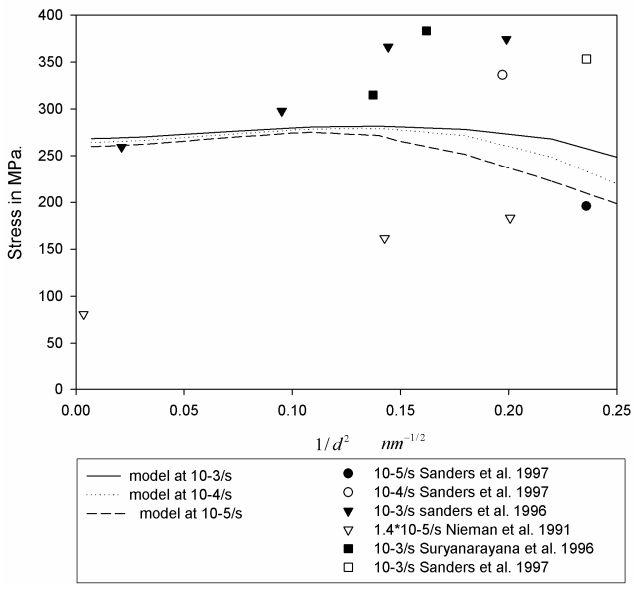


Figure IV-11: Evolution de la contrainte d'écoulement avec la taille de grain

Références partielles

Capolungo, L., M. Cherkaoui, et al. (2004). Homogenization method for strength and inelastic behavior of nanocrystalline materials. Size effects on material and structural behavior at micron and nanometer-scales, Hong Kong, Kluwer Academic Publisher**.**

Capolungo, L., C. Jochum, et al. (2005). "Homogenization method for strength and inelastic behavior of nanocrystalline materials." International journal of plasticity **21**: 67-82.

Cherkaoui, M., Q. Sun, et al. (2000). "Micromechanics modeling of composite with ductile matrix and shape memory alloy reinforcement." International journal of solids and structures **37**: 1577-1594.

Coble, R. L. (1963). "A Model for Boundary Diffusion Controlled Creep in Polycrystalline Materials." Journal of Applied Physics **34**(6): 1679-1682.

Estrin, Y. (1998). "Dislocation theory based constitutive modelling: foundations and applications." Journal of the materials processing technology **80-81**: 33-39.

Estrin, Y. and H. Mecking (1984). "A unified phenomenolgical description of work hardening and creep based on one parameter models." Acta metallurgica **32**: 57_70.

Kim, H. S., Y. Estrin, et al. (2000). "Plastic deformation behaviour of fine grained materials." Acta materialia **48**: 493-504.

Kim, H. S., Y. Estrin, et al. (2001). "Constitutive modelling of strength and plasticity of nanocrystalline metallic materials." Materials science and engineering **A316**: 195-199.

Luthy, H., R. A. White, et al. (1979). "Grain boundary sliding and deformation mechanism maps." Materials Science and Engineering **39**(2): 211-216.

Nieman, G. W., J. R. Weertman, et al. (1991). "Mechanical behavior of nanocrystalline Cu and Pd." Journal of materials research **6**: 1012-1027.

Sanders, P. G., J. A. Eastman, et al. (1996). Processing and Properties of Nanocrystalline Materials. Warrendale, PA, TMS.

Sanders, P. G., J. A. Eastman, et al. (1997). "Elastic and tensile behavior of nanocrystalline copper and palladium." Acta metallurgica **45**: 4019-4025.

Surayanarayana, R., R. Frey, et al. (1996). "Deformation, recovery, and recrystallization behavior of nanocrystalline copper produced from solution-phase synthesized nanoparticles." Journal of alloys and compounds **11**: 449-457.

Youngdahl, C. J., P. G. Sanders, et al. (1997). "Compressive yield strengths of nanocrystalline Cu and Pd." Scripta materialia **37**: 809-813.

Chapitre V. Modélisation de l'émission de dislocations

Dans ce chapitre nous proposons une modélisation de l'effet de taille dans le comportement des nanomatériaux basée sur l'émission de dislocations par les joints de grain (Capolungo et al. 2005b; Capolungo et al. 2005a), ce choix étant motivé par les récents travaux de DM et observations au MEC présentés dans le chapitre dédié à l'état de l'art.

Dans un premier temps, une nouvelle loi de comportement est développée pour traduire l'effet de l'émission des dislocations par les joints de grain sur le comportement macroscopique du matériau. Comme dans les chapitres précédents, le matériau sera assimilé à un composite biphasé où la phase inclusionnaire représente les cœur de grains et la phase matrice représente les joints de grains et lignes triples. Le comportement des cœurs de grain est dominé par le glissement des dislocations pour lequel les modèles typiques d'écrouissage seront modifiés suite à une discussion traitant de leurs limitations. Une nouvelle expression de la contrainte d'écoulement à 0 K est introduite pour rendre compte des contraintes exercées à distances par les joints de grains sur les dislocations mobiles. De plus, l'effet de taille sur le volume d'activation du glissement des dislocations, engendré par les contraintes à distances exercées par les joints de grains, est inclus dans cette modélisation. L'émission des dislocations qui contrôle le comportement des joints de grain est modélisée à l'aide d'un mécanisme thermiquement activé. Afin de s'affranchir des problèmes liés à la surestimation du comportement plastique résultant de l'utilisation du schéma d'homogénéisation de Cherkaoui et al., le schéma sécant de Berbenni et al. est privilégié. Le modèle est par la suite appliqué à la prédiction du comportement du matériau en traction uni-axiale (à différentes températures, taille de grains et taux de déformation) et en fluage. Notons qu'ici l'implémentation numérique est réalisée en trois dimensions, les développements sont présentés dans l'annexe du chapitre.

Dans un second temps, nous proposons une méthode originale d'évaluation des constantes nécessaires à la description précise du mécanisme thermiquement activé d'émission de dislocations basée sur la DM et réalisée en collaboration avec Dr. Spearot. Un rappel de dynamique moléculaire est présenté avant la présentation de la méthode de calcul des constantes.

Enfin, nous présenterons une application simple par éléments finis permettant une visualisation plus précise des états de contraintes et de déformations dans le matériau. Ces simulations nous éclairerons sur la localisation possible de concentration de contrainte dans les joints de grains et lignes triples.

A. Modèle continu

Les conventions d'écriture des tenseurs de contraintes et de déformations locaux et globaux, et des références aux différentes phases présentées au chapitre précédent sont utilisées dans le chapitre présent. Considérons tout d'abord le comportement de la phase inclusionnaire.

1. Comportement de la phase inclusionnaire

Le comportement de la phase inclusionnaire est élasto-viscoplastique par la nature même du mécanisme de glissement des dislocations et s'écrit par conséquent :

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{I} = \boldsymbol{C}^{I} : \left(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{I} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{I,vp} \right) \tag{5.1.1}$$

Où '$\boldsymbol{C}^{I}$' et '$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{I,vp}$ sont respectivement le tenseur de quatrième ordre des modules d'élasticité et le tenseur de second ordre des taux de déformation viscoplastique. Ce dernier est lié au taux de déformation viscoplastique équivalent, '$\dot{\varepsilon}_{eq}^{I,VP}$', par la loi de Prandtl Reuss définie ci-dessous :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{I,vp} = \frac{3}{2}\left(\frac{\dot{\varepsilon}_{eq}^{I,vp}}{\sigma_{eq}^{I}} \right) \boldsymbol{\sigma}_{dev}^{I} \tag{5.1.2}$$

Ici, '$\boldsymbol{\sigma}_{dev}^{I}$' et'$\sigma_{eq}^{I}$' dénotent respectivement la partie déviatorique du tenseur des contraintes de Cauchy et la contrainte équivalente de Von Mises donnée par by $\sigma_{eq}^{I} = \sqrt{3/2\left(\boldsymbol{\sigma}_{dev}^{I} : \boldsymbol{\sigma}_{dev}^{I}\right)}$. Le glissement des dislocations est thermiquement activé et donné par :

$$\dot{\varepsilon}_{eq}^{I,VP} = \dot{\varepsilon}_{0}\left(\frac{\sigma_{eq}^{I}}{\sigma_{f}} \right)^{m} \tag{5.1.3}$$

Le coefficient d'écrouissage est un paramètre critique dans la description du mécanisme de glissement des dislocations car il traduit de sa nature thermiquement activée. Récemment, la dépendance de 'm' avec la taille de grain a été mise en lumière dans les travaux de Cheng et al.. Les auteurs supposent que l'effet de taille dans le coefficient d'écrouissage provient du volume d'activation qui lui dépendrait également de la taille de grain. Ainsi le coefficient d'écrouissage est donné par (Cheng et al. 2005) :

$$m = \frac{\sigma_f \times \Lambda \times \xi \times b}{k_b T} \qquad (5.1.4)$$

Où,' k_b ', ' T ', ' b ', ' ξ ', ' l^* ' and ' σ_f ' représentent respectivement la constante de Boltzmann, la température, la norme du vecteur de Burger, la distance parcourue par une dislocation durant l'évènement d'activation, la distance entre les obstacles au mouvement des dislocations et la contrainte d'écoulement à 0 Kelvin. On reporte des valeurs de « m » allant de ~200 dans le cas des matériaux conventionnels à ~30 dans le cas des matériaux NC (Cheng et al. 2005). Comme nous l'avons précisé dans l'état de l'art, les approches statistiques décrivant le libre parcours moyen des dislocations mènent à des valeurs nettement supérieures à celles reportés expérimentalement. Ainsi l'expression (5.1.4) est pondérée par un facteur de proportionnalité inclus dans ξ qui est déterminé de telle sorte qu'à une taille de grain de 10 micros, le coefficient d'écrouissage soit égal à 230.

A zéro Kelvin, l'écoulement plastique se produit si la contrainte appliquée sur la boucle de dislocation excède les effets du réseau cristallin, des dislocations stockées et des joints de grains qui sont dénotés respectivement par, σ_0 , σ_{dis} et σ_{GB} . Ainsi, l'expression de la contrainte d'écoulement à zéro Kelvin est donnée par (Wei et al. 2004) :

$$\sigma_f = \sigma_0 + \sigma_{dis} + \sigma_{GB} \qquad (5.1.5)$$

Où l'effet des dislocations et des joints de grains s'écrivent respectivement $\sigma_{dis} = \alpha G M b \sqrt{\rho}$ et $\sigma_{GB} = \beta / \sqrt{d}$. Ici,' α ',' G ',' M 'et ' $\boldsymbol{\rho}$ ' dénotent respectivement une constante décrivant l'interaction des dislocations, le module de cisaillement, le facteur de Taylor, la densité de dislocations. Remarquons ici que nous raisonnons sur une densité de dislocations non normalisée, ce qui permet, si nécessaire, d'ajuster la densité initiale de dislocations par rapport au traitement que subit le matériau lors de sa fabrication. Le terme résultant de la friction exercée par les atomes environnant la dislocation est négligeable par rapport aux termes relatant des effets des dislocations stockées (qui peuvent s'arranger en cellules dans le cas des fortes déformations) et des joints de grains. La dépendance de la contrainte d'écoulement avec la densité de dislocations stockées est donnée par la relation de Taylor (Taylor 1934).

Un effet de taille est pris en compte dans l'expression (5.1.5), ce terme relate de la contribution de la présence des joints de grains, qui agissent alors comme des obstacles à longues distances, cette expression fut proposé par Wei (Wei et al. 2004). Rappelons encore que Li a démontré que la présence d'empilements de dislocations n'est pas nécessaire pour obtenir une dépendance de la contrainte d'écoulement avec l'inverse de la taille de grain (Li 1963).

A une taille de grain donnée, la réponse de la phase inclusionnaire est déterminée par l'évolution des dislocation qui est régit par deux phénomènes : (1) le stockage athermique des dislocation et, (2) l'annihilation des dislocations par le mécanisme de recouvrage dynamique.

Reprenons ici le développement de Kocks et Mecking basé sur une approche statistique, ce qui permettra par la suite d'en démontrer les limites dans le cas de l'effet de taille. L'accumulation des dislocations est décrite par :

$$\frac{d\rho^{+}}{d\varepsilon_{eq}^{I,vp}} = \frac{M}{b\Lambda} \qquad (5.1.6)$$

Ici, ' Λ ' et ' ρ^{+} ' représentent respectivement le libre parcours moyen des dislocations mobiles et la densité de dislocation stockées. Le libre parcours moyen des dislocations est la moyenne arithmétique du libre parcours moyen dû aux dislocations stockées,' Λ^{*} ', et du libre parcours moyen dû à la présence des joints de grain, ' Λ^{**} ' ,qui dépend directement de la taille de grain. On peut ainsi conclure que $\Lambda^{**} = d$ et (5.1.6) devient donc :

$$\frac{d\rho^{+}}{d\varepsilon_{eq}^{I,vp}} = M\left(\frac{1}{bd} + \frac{1}{b\Lambda^{*}}\right) \qquad (5.1.7)$$

L'expression (5.1.7) définit l'étape II de l'écrouissage. Si l'on considère ce dernier comme résultant de l'occurrence simultanée de tous les phénomènes impliqués dans la déformation plastique, dont les contributions évoluent avec l'état de déformation, on peut alors supposer que le concept de similitude qui lie la densité de dislocations aux sous structures présentes dans le grain (Nes 1997) peut s'appliquer dans toutes les étapes de la déformation. Ainsi avec la similitude, on obtient à partir de (5.1.7) :

$$\frac{d\rho^{+}}{d\varepsilon_{eq}^{I,vp}} = M\left(\frac{1}{bd} + \frac{\psi\sqrt{\rho}}{b}\right) \qquad (5.1.8)$$

Ici ' $\boldsymbol{\psi}$ ' est un coefficient de proportionnalité.

Le recouvrage dynamique mène à un assouplissement de la réponse plastique des cristaux résultant de l'annihilation des dislocations stockées. On le traite typiquement comme un mécanisme thermiquement activé dont l'expression empirique est donnée par (Estrin et al. 1984; Estrin 1998):

$$\frac{d\rho^{-}}{d\varepsilon_{eq}^{I,vp}} = -k_{20}\left(\frac{\dot{\varepsilon}_{eq}^{I,vp}}{\dot{\varepsilon}_{*}}\right)^{-1/n} \tag{5.1.9}$$

Ici, 'n' est proportionnel à l'inverse de la température, on reporte une valeur de 21.25 à 300 Kelvin (Estrin et al. 1984), k_{20}^{*} est une constante, ρ^{-} la densité de dislocation annihilées et $\dot{\varepsilon}_{*}$ un taux de déformation de normalisation. En combinant (5.1.8) et (5.1.9) on obtient alors l'expression suivante décrivant l'évolution de la densité de dislocations :

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon_{eq}^{I,vp}} = M\left(\frac{1}{bd} + \frac{\psi\sqrt{\rho}}{b}\right) - k_{20}\left(\frac{\dot{\varepsilon}_{eq}^{I,vp}}{\dot{\varepsilon}_{*}}\right)^{-1/n}\rho \tag{5.1.10}$$

Dans un souci de cohérence avec les travaux de Estrin et al. et Kocks (Kocks 1976; Estrin et al. 1984), l' équation (5.1.10) est réécrite comme suit:

$$\frac{\partial\rho}{\partial\varepsilon^{p}} = M\left(\frac{k}{d} + k_1\sqrt{\rho} - k_2\rho\right) \tag{5.1.11}$$

Avec

$$k = \frac{1}{b}\ ,\ k_1 = \frac{\psi}{b}, k_2 = k_{20}\left(\frac{\dot{\varepsilon}_{eq}^{I,vp}}{\dot{\varepsilon}_{*}}\right)^{-1/n} \tag{5.1.12}$$

2. Discussion:

Discutons désormais des limitations des modèles typiques traitant de l'écrouissage, ce qui justifiera l'introduction du terme σ_{GB} dans (5.1.5). Supposons le taux de déformation plastique et le coefficient d'écrouissage constants, alors le système d'équations (5.1.3)-(5.1.12) peut être intégré analytiquement et comparé au modèle de Kocks et Mecking (K-M) et au modèle hybride de Estrin et Mecking (E-K). Considérons le cas simple de la traction pure. Dans les models K-M et E-K, la contrainte d'écoulement à zéro Kelvin est donnée par $\sigma_f = \alpha MGb\sqrt{\rho}$. Dans le modèle de K-M, l'évolution de la densité de dislocations avec la déformation plastique est donnée par : $\frac{d\rho}{d\varepsilon^{p}} = M\left(k_1\sqrt{\rho} - k_2\rho\right)$. ε^{p} est la déformation plastique

suivant la direction de traction. Après un peu d'algèbre (les développements suivant seront présentés dans le détail dans l'annexe), le modèle de K-M prédit l'évolution suivante du taux d'écrouissage $\theta = \frac{d\sigma}{d\varepsilon^p}$:

$$\theta = \theta_{II}\left(1 - \frac{\sigma}{\sigma_s}\right) \tag{5.1.13}$$

Où ' θ_{II} ' et ' σ_s ' représentent respectivement le taux d'écrouissage au début de l'étape II de l'écrouissage et la contrainte de saturation et sont donnés par :

$$\theta_{II} = \frac{1}{2} M^2 \alpha G b k_1 \left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m} \tag{5.1.14}$$

et

$$\sigma_s = \alpha M G b \frac{k_1}{k_{20}} \left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m} \left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_*}\right)^{1/n} \tag{5.1.15}$$

On remarque alors qu'aucun n'effet de taille n'est pris en compte dans le pris compte dans les développements de K-M. Dans le souci de s'affranchir de cette limitation, E-K ont introduit un modèle hybride où l'effet de taille provient de la réduction du libre parcours moyen dû à la présence des joints de grain. Ainsi l'évolution de la densité de dislocation est donnée par :

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon^p} = M\left(\frac{k}{d} + k_1\sqrt{\rho} - k_2\rho\right) \tag{5.1.16}$$

Dans l'expression (5.1.16), le paramètre permettant de décrire l'effet des joints de grains est donné par : ' $k = \frac{1}{b}$ '. Toujours dans l'hypothèse d'un taux de déformation et d'un coefficient d'écrouissage constant, on peut intégrer analytiquement le modèle E-K, on obtient alors après développement :

$$\theta = \frac{M}{\sigma}\frac{k_2}{2}\left(\sigma_s^h\right)^2\left[1 - \kappa + \kappa\frac{\sigma}{\sigma_s^h} - \left(\frac{\sigma}{\sigma_s^h}\right)^2\right] \tag{5.1.17}$$

Où la contrainte de saturation σ_s^h et le coefficient κ sont donnés par:

$$\sigma_s^h = \alpha MGb \frac{k_1}{k_2} \frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}^{\frac{1}{m}} \kappa^{-1} \text{ et } \qquad \kappa = 2\left[1+\left(1+\frac{4kk_2}{dk_1^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^{-1} \tag{5.1.18}$$

Comme le rappellent Kocks et Mecking, bien qu'un effet de taille soit pris en compte dans le modèle hybride de E-K, ce dernier ne permet pas de décrire avec précision l'augmentation de la contrainte d'écoulement suivant une diminution de la taille de grain. Le modèle hybride mène à des prédictions du coefficient de la loi de Hall et Petch de l'ordre de 10 % des valeurs mesurées. La Figure V-1 présente un diagramme de Haasen, établi à partir des mesures expérimentales réalisées par Sanders et al.. pour deux tailles de grains ; 20 microns et 110 nm (Sanders et al. 1997a). On observe alors un décalage positif du produit de la contrainte maximale par le taux d'écrouissage avec une diminution de la taille de grain. Présentons désormais le graphique de Haasen prédit par le modèle E-K correspondant à celui présenté précédemment (Figure V-2). Les constantes définissant l'évolution de la densité de dislocations ont été évaluées afin d'obtenir la meilleure description des courbes contraintes déformation présentées par Sanders et al. On observe que comparativement aux courbes expérimentales, le modèle de EK ne prédit pas le décalage des maxima, ce qui provient du fait que la contrainte d'écoulement à zéro Kelvin ne tient pas compte de l'effet de résistance provoqué à distance par les joints de grain.

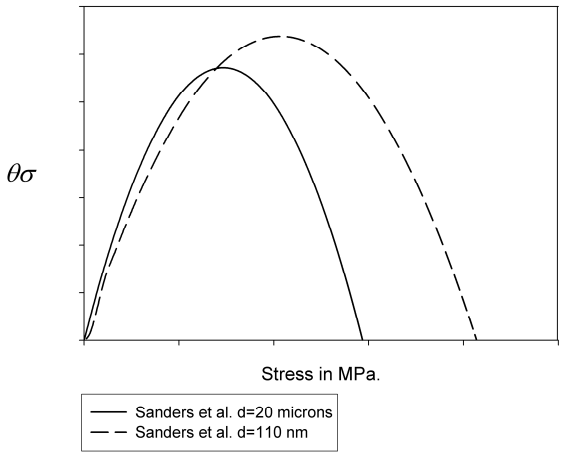


Figure V-1: Graphique de Haasen expérimental

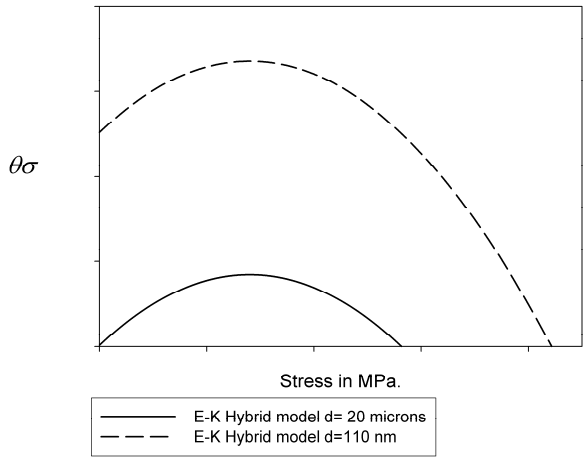


Figure V-2: Graphique de Haasen prédit par le modèle hybride de E-K

En s'affranchissant de la dépendance du coefficient d'écrouissage avec la taille de grain, ce qui ne devient non négligeable que dans le cas de comportement en fluage, le modèle développé ici (que l'on nommera C-C-Q), qui lui rend compte de l'effet des joints de grains sur la contrainte d'écoulement à zéro Kelvin, peut être lui aussi intégré analytiquement et on obtient après calcul:

$$\theta = \frac{Mk_2\sigma_s^2}{2\left[\sigma\left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{-1/m} - \frac{\beta}{\sqrt{d}}\right]}\left[1-\left(\frac{\sigma}{\sigma_s}\right)^2 - 2\left(1-\frac{\sigma}{\sigma_s}\right)(1+Z)\left(1+Z+\left(1+\frac{4k_2k}{d}\right)^{\frac{1}{2}}\right)^{-1}\right] \qquad (5.1.19)$$

Où la contrainte de saturation est donnée par :

$$\sigma_s = \frac{\alpha MGbk_1}{2k_2}\left(1+\frac{2\beta k_2}{\alpha MGbk_1\sqrt{d}}+\left(1+\frac{4k_2k}{dk_1^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right) \qquad (5.1.20)$$

et :

$$Z = \frac{2\beta k_2}{\alpha MGbk_1\sqrt{d}} \qquad (5.1.21)$$

On remarque que l'on peut recouvrer le modèle de E-K à partir du modèle de C-C-Q en ignorant l'effet des joints de grain sur la contrainte d'écoulement à zéro Kelvin en fixant $\beta = 0$. Le modèle C-C-Q permet lui de prédire le décalage observé dans le diagramme de Haasen. De plus, le modèle présenté ici

permet de prédire une augmentation plus prononcée de la contrainte de saturation avec une décroissance de la taille de grain.

3. Loi de comportement de la phase matrice

Traitons désormais du comportement de la phase matrice où la déformation plastique locale se produit par émission de dislocations par les joints de grains et les lignes triples, phénomène qui devient non négligeable dans le domaine NC. Comme rappelé dans le chapitre dédié à l'état de l'art, le mécanisme d'émission est thermiquement activé. Puisque la présence de forets de dislocations devient énergétiquement moins favorable dans le domaine NC, on s'attend à ce qu'une dislocation émise traverse le cristal pour finir sa course dans le joint de grain opposé occasionnant un transfert de masse dans le joint de grain (voir Figure V-3). De récentes simulations de DM ont révélé que la création d'un « ledge » suit l'émission d'une dislocation par un joint de grains. Les simulations ne révèlent aucun transfert de masse à distance près de la source (Spearot et al. 2005). Ainsi dans ce modèle nous proposons de considérer négligeable l'effet direct de l'émission sur la déformation plastique. Précisément, on suppose qu'une dislocation émise engendre deux effets locaux: la création d'un « ledge » qui sera ignorée dans cette première approche, et la création d'un transfert de masse dans le joint de grains opposé à la source. Ce dernier est responsable de la déformation plastique des joints de grains. On suppose aussi que les «ledges» sont les sources premières de dislocations bien que cela n'influence pas le modèle. Cependant une approche basée sur des travaux de DM permettant l'identification des sources principales de dislocation sera présentée dans la section suivante.

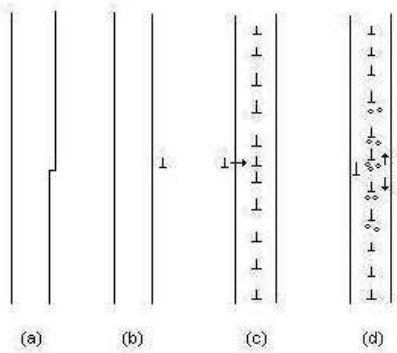


Figure V-3: Schéma du mécanisme d'émission et de pénétration de dislocations

Si l'on considère que chaque dislocation émise pénètre dans le joint de grains opposé à la source, le taux de déformation viscoplastique $\dot{\varepsilon}_M^{eq}$ peut alors s'écrire comme le produit d'un taux d'activation, décrivant

la pénétration de la dislocation, par la probabilité que l'événement d'émission soit un succès. Expérimentalement, on ne remarque que très rarement la présence de débris de dislocation au sein même des cœurs de grains, ce qui indique que l'activité des dislocations émises est complète. Ainsi, puisque une dislocation partielle émise est le plus souvent suivie d'une seconde dislocation partielle, on peut considérer que l'événement critique dans l'émission de dislocations par les joints de grain est l'émission de la première dislocation partielle. On écrit donc le taux de déformation plastique équivalent dans la phase matrice à l'aide d'une expression typique des mécanismes thermiquement activés :

$$\dot{\varepsilon}_{eq}^{M} = N_s \dot{\varepsilon}_0^M \exp\left(-\frac{\Delta G_0\left(\theta_{mis}\right)}{k_B T}\left(1-\left(\frac{\sigma_{eq}^M}{\sigma_c^M\left(\theta_{mis}\right)}\right)^p\right)^q\right) \tag{5.1.22}$$

Où, '$\dot{\varepsilon}_0^M$' et 'N_s' dénotent respectivement le taux de déformation engendré par un seul événement d'émission-pénétration et le nombre de sites d'émission. 'k_B', 'T', 'σ_{eq}^M', 'σ_M^c' représentent respectivement la constante de Boltzmann, la température en Kelvin, la contrainte équivalente de Von Mises dans la phase matrice, définie par $\sigma_{eq}^M = \sqrt{3/2\left(\sigma_{dev}^M : \sigma_{dev}^M\right)}$ où σ_{dev}^M dénote la partie déviatorique du tenseur des contraintes de Cauchy, et la contrainte critique d'émission. Les paramètres «p» et «q» décrivent l'évolution de l'enthalpie d'activation avec la contrainte locale. La probabilité que l'événement d'émission soit un succès est donnée par une distribution de Boltzmann. Ainsi, ΔG_0 dénote l'enthalpie libre d'activation qui correspond à l'énergie qui doit être apportée sans l'aide des fluctuations thermiques à une dislocation pour que cette dernière passe d'une configuration stable, où la dislocation est encore incluse dans le joint de grain, à une configuration instable avec énergie motrice positive. Cette configuration est atteinte lorsqu'une dislocation émise a parcouru une distance minimale telle qu'elle ne revienne pas dans le joint de grain source si les contraintes externes appliquées au système sont supprimées.

Puisque l'émission de dislocations est un procédé local, l'enthalpie libre et la contrainte critique d'émission à zéro Kelvin dépendent tout deux de la géométrie du joint de grain. Dans un souci de simplicité, la géométrie du joint de grain est décrite par un seul angle d'inclinaison (voir l'expression (5.1.22) et la Figure V-4). Une approche plus raffinée tiendrait compte des cinq degrés de liberté des joints de grains. L'étude de l'évolution de ΔG_0 et de σ_M^c avec la géométrie du joint de grains sera présentée dans une section prochaine.

On approxime le taux de déformation engendré par un unique événement, $\dot{\varepsilon}_0^M$, en considérant l'interaction entre la dislocation émise et l'interface comme un choc mou. Si 'm_{dis}', 'm_{GB}', '$\vec{v}_{dis}$', '$\vec{v}_{GB}$'

dénotent respectivement la masse effective d'une dislocation, la masse de l'interface, et les vecteurs vitesse de la dislocation et du joint de grain, on obtient alors par la conservation du moment cinétique:

$$m_{dis}\vec{v}_{dis} = \left(m_{dis} + m_{GB}\right)\vec{v}_{Gb} \qquad (5.1.23)$$

Soit θ l'angle entre le plan de glissement et l'axe longitudinal du joint de grain (l'axe des x, voir Figure V-4). La masse introduite dans le joint de grain par la pénétration d'une dislocation aura deux effets dont les contributions relatives dépendent de 'θ': (1) un transfert de masse le long de l'axe longitudinal et, (2) un transfert de masse le long de l'axe transverse du joint de grain. Ce dernier pourrait mener à la création d'un nouveau « ledge». Puisque la plupart des joints de grains ont de larges angles d'inclinaison, on supposera négligeable la composante transverse du vecteur vitesse.

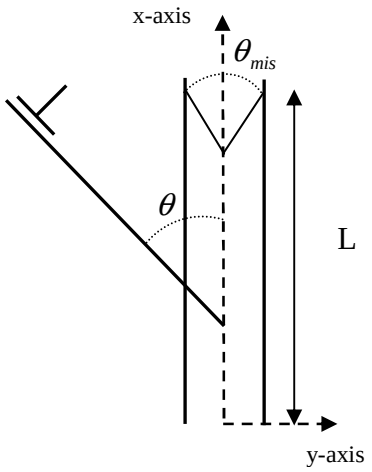


Figure V-4: Schéma de la pénétration de dislocations

En projetant l'équation (5.1.23) sur l'axe longitudinal et en divisant la vitesse par la longueur de la région inter cristalline affectée par le transfert de masse L, on obtient le taux de déformation moyen engendré par la pénétration de la dislocation émise :

$$\dot{\varepsilon}_{GB}^{0} = \frac{m_{dis}}{m_{dis} + m_{GB}} \frac{v_{dis}\sin\theta}{L} \qquad (5.1.24)$$

De plus, dans le cas limite, la masse transférée par la dislocation n'est supposée avoir un effet que sur une face du grain, car les lignes triples agiraient alors comme barrière à la diffusion de masse, et donc 'L' est supposé proportionnel à la taille de grain, on notera le coefficient de proportionnalité ι. La vitesse d'une dislocation, 'v_{dis}', est donnée par :

$$v_{dis} = v_0 \left(\frac{\sigma_{eq}^I}{\sigma_c^I} \right)^m \tag{5.1.25}$$

Où, ‘ v_0 ’ est un facteur de proportionnalité. On suppose ici que la densité de sources de dislocations par unité d'aire est constante. Cependant le nombre de sources dans le VER augmente suite à une diminution de la taille de grain qui engendre une augmentation de la surface totale d'interfaces grains/joints de grain. On obtient alors:

$$N_s \propto \frac{n_{ledge}}{\pi d^2} = \frac{\delta}{d^2} \tag{5.1.26}$$

Où‘ δ ’ est un facteur de proportionnalité. Ainsi en combinant le système d’équation précédent, on considère que :

$$\dot{\varepsilon}_{eq}^M = \frac{\chi}{d^3} \left(\frac{\sigma_{eq}^I}{\sigma_c^I} \right)^m \exp\left(-\frac{\Delta G_0 \left(\theta_{mis} \right)}{k_B T} \left(1 - \left(\frac{\sigma_{eq}^M}{\sigma_c^M \left(\theta_{mis} \right)} \right)^p \right)^q \right) \tag{5.1.27}$$

Avec

$$\chi = \frac{m_{dis} v_0 \delta \sin\left(\theta \right)}{\left(m_{dis} + m_{GB} \right) \iota} \tag{5.1.28}$$

En utilisant la loi d’écoulement de Prandtl Reuss on lie alors le taux de déformation élasto-viscoplastique équivalent à son homologue tensoriel.

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{M,vp} = \frac{3}{2} \left(\frac{\dot{\varepsilon}_{eq}^M}{\sigma_{eq}^M} \right) \boldsymbol{\sigma}_{dev}^M \tag{5.1.29}$$

Enfin, le comportement de la phase matrice est élasto-viscoplastique et s’écrit donc comme suit :

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}^M = \boldsymbol{C}^M : \left(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^M - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{M,vp} \right) \tag{5.1.30}$$

Ici, C_{ijkl}^M est le tenseur de quatrième ordre des modules d’élasticité.

4. Transition d'échelles

En travaillant avec le même VER que celui utilisé au chapitre précédent, on utilise un schéma sécant autocohérent, dont les dérivations sont présentées dans l'annexe consacrée à la transition d'échelles, pour extraire le comportement macroscopique du matériau à partir des comportements locaux (Berbenni et al. 2004). Macroscopiquement le matériau a un comportement élasto-viscoplastique que l'on écrit comme suit :

$$\dot{\boldsymbol{E}} = \dot{\boldsymbol{E}}^{e} + \dot{\boldsymbol{E}}^{vp} = \boldsymbol{S}^{e} : \dot{\boldsymbol{\Sigma}} + \boldsymbol{M}^{e} : \boldsymbol{\Sigma} \qquad (5.2.1)$$

Où $\dot{\boldsymbol{E}}$, $\dot{\boldsymbol{E}}^{e}$, $\dot{\boldsymbol{E}}^{vp}$, $\dot{\boldsymbol{S}}^{e}$, $\boldsymbol{M}^{e}$, $\boldsymbol{\Sigma}$ et $\dot{\boldsymbol{\Sigma}}$ dénotent respectivement le tenseur de second ordre des taux de déformation macroscopique, le tenseur de complaisance effectif, le tenseur de viscosité de quatrième ordre, et le tenseur des contraintes de Cauchy et son taux. Par identification on obtient aussi la relation suivante $\dot{\boldsymbol{E}}^{vp} = \boldsymbol{M}^{e} : \boldsymbol{\Sigma}$.

La relation de concentration, reliant le tenseur des taux de déformation locaux au tenseur des taux de déformation global :

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{r} = \boldsymbol{A}^{Cer} : \left(\dot{\boldsymbol{E}} - \dot{\boldsymbol{E}}^{vp}\right) + \boldsymbol{A}^{Cer} : \boldsymbol{A}^{Ber} : \dot{\boldsymbol{E}}^{vp} + \boldsymbol{A}^{Cer} : \boldsymbol{S}^{E} : \boldsymbol{S}^{e} : \left(\boldsymbol{C}^{r} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp,r} - \boldsymbol{C}^{e} : \boldsymbol{A}^{Ber} : \dot{\boldsymbol{E}}^{vp}\right)$$

avec r :I,M (5.2.2)

$\boldsymbol{S}^{E}$, $\boldsymbol{A}^{Cer}$, $\boldsymbol{A}^{Ber}$, $\boldsymbol{S}^{e}$ et son inverse $\boldsymbol{C}^{e}$ dénotent le tenseur d' Eshelby, le tenseur de concentration élastique, le tenseur de concentration viscoplastique, le tenseur effectif de complaisance et le tenseur des modules d'élasticité effectif. En appliquant la loi de Hooke et après un peu d'algèbre on obtient :

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{C}^{r} : \boldsymbol{A}^{Cer} : \boldsymbol{S}^{e} : \dot{\boldsymbol{\Sigma}} + \boldsymbol{C}^{r} : \boldsymbol{A}^{Cer} : \left(\boldsymbol{S}^{E} - \boldsymbol{I}\right) : \left(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp,r} - \boldsymbol{A}^{Ber} : \dot{\boldsymbol{E}}^{vp}\right) \qquad (5.2.3)$$

En supposant les inclusions sphériques, les tenseurs de localisation sont constants dans chaque phase et s'écrivent donc comme suit:

$$\boldsymbol{C}^{e} = \overline{\boldsymbol{C}^{r} : \boldsymbol{A}^{Cer}} \qquad (5.2.4)$$

I et S^{E} représentent le tenseur d'identité de quatrième ordre et le tenseur d'Eshelby. Les tenseurs de concentration sont donnés par:

$$\boldsymbol{A}^{Cer} = \left[\boldsymbol{I} + \boldsymbol{S}^{E} : \boldsymbol{C}^{e} : \left(\boldsymbol{C}^{r} - \boldsymbol{C}^{e} \right) \right]^{-1} \tag{5.2.5}$$

On évalue directement le tenseur des modules d'élasticité effectif par le schéma autocohérent:

$$\boldsymbol{B}^{e} = \overline{\boldsymbol{B}^{r} : \boldsymbol{B}^{Cer}} \tag{5.2.6}$$

Où 'c' dénote les tenseurs d'élasticité locaux. On extrait le tenseur de viscosité effectif et son inverse B^e en utilisant le schéma d'homogénéisation non conventionnel:

$$\boldsymbol{A}^{Ber} = \left[\boldsymbol{I} + \boldsymbol{S}^{E} : \boldsymbol{B}^{e} : \left(\boldsymbol{b}^{r} - \boldsymbol{B}^{e} \right) \right]^{-1} \tag{5.2.7}$$

Ici, 'b' dénote l'inverse du tenseur de viscosité local dans la phase inclusionnaire et dans la phase matrice.

5. *Résultats*

Dans cette section nous présenterons les prédictions du modèle sur le comportement en traction simple dans le régime quasi-statique et sur le comportement en fluage du matériau, le matériau de référence utilisé est le Cuivre. Présentons tout d'abord comment sont évalués les paramètres numériques utilisés dans les simulations.

a) Evaluation de constantes

Les paramètres suivants décrivant le comportement de la phase inclusionnaire sont pour la plupart extraits du travail de Estrin et al. (Estrin et al. 1984): $\alpha = .33$, le facteur de Taylor $M = 3.06$. Le vecteur de Burger $b = .256E-9$ m, $\mu^{I} = 38400 MPa.$ (extrait de Sanders et al. (Sanders et al. 1997a)), $\dot{\varepsilon}_0 = 0.005/s$ et $n = 21.25$ à température ambiante et est inversement proportionnel à la température.

On détermine le paramètre $\xi = 3.507E-4$ de sorte que le coefficient d'écrouissage 'm' prenne une valeur de 230 lorsque la taille de grain est de l'ordre de plusieurs microns, valeur mesurée expérimentalement dans les travaux de Estrin et al (Estrin et al. 1984).

Le coefficient β, décrivant l'effet des obstacles à distance sur la contrainte d'écoulement à zéro Kelvin, est choisi tel qu'il soit consistant avec la loi de Hall et Petch, ainsi dans le cas du Cuivre on obtient : $\beta = 0.11\ MPa \cdot m^{-1/2}$.

Les paramètres définissant l'évolution de la densité de dislocation sont établis à l'aide du système d'équations (5.1.19)→(5.1.21), afin d'obtenir la meilleure description de la réponse en traction uni axiale d'un échantillon de Cuivre ayant une taille de grain de 20 microns (Sanders et al. 1997a), on obtient ainsi; $k_0 = \frac{1}{b} = 3.5E9\ \text{m}^{-1}$, $k_1 = 1.E10\ \text{m}^{-1}$ et $k_{20} = 330$. Précisons ici qu'un algorithme basé sur l'utilisation de réseau de neurones artificielles pourrait être développé par la suite afin d'obtenir la meilleure description possible de la réponse macroscopique du matériau de référence.

Traitons désormais des constantes décrivant le comportement de la phase matrice. Bien qu'une nouvelle méthode d'évaluation sera présentée par la suite, montrons dans un premier temps de quelle manière, avec l'appui de travaux existants, on peut obtenir l'ordre de grandeur des données nécessaire à la description de l'émission et pénétration de dislocations. L'ordre de grandeur de la contrainte critique d'émission d'une dislocation, σ_c^M, est estimé à partir des simulations de DM de Spearot et al. sur un bicristal d'aluminium formé d'une interface de type $\Sigma 5$, la simulation est réalisée à 10 Kelvin, ce qui minimise ainsi l'effet des fluctuation thermiques, et mène à une valeur de 2.96 GPa. Comme précisé au dessus σ_c^M dépend bien très fortement de la géométrie ainsi les calculs de DM ne permet d'obtenir qu'un ordre de grandeur de la contrainte critique d'émission. Plus précisément, certains joints de grains pourraient avoir une contrainte critique d'émission plus faible ou plus forte. On suppose aussi que le fait que les simulations soient réalisées à 10 Kelvin n'influence que très peu l'ordre de grandeur de la contrainte critique d'émission. En considérant le fait que les joints de grains comportent le plus souvent des vides et atomes d'impureté, ce qui devrait favoriser l'émission de dislocations, on supposera la contrainte critique d'émission égale à 2.2 GPa.

ΔG_0 est estimé à partir du travail de Gutkin et al. sur l'émission de dislocations due au déplacement d'un dipôle de désinclinaison (Gutkin et al. 2003). Ici encore nous ne pouvons évaluer qu'un ordre de grandeur de l'enthalpie libre d'activation à partir de ce travail théorique. Considérons le cas d'un joint de grain de type sigma 5 (3 1 0) 36.9° que l'on peut décrire à l'aide d'une série de dipôles de désinclinaison de force ω=0.64. Supposons que les dislocations émises forment un angle de 45° avec l'axe longitudinal du joint de grains et que la distance minimale à laquelle la dislocation a atteint une configuration instable avec énergie motrice positive soit égale à la norme d'un vecteur de Burger, le modèle de Gutkin et al. montre alors que $\Delta W \approx -.1 \cdot Gb^2$ par unité de longueur de dislocation.

Les coefficients 'p' et 'q', qui décrivent la "forme" du diagramme d'émission sont choisis tels que ce dernier soit abrupt ainsi on a p=1.et q=1.5 (Kocks et al. 1975).

On supposera aussi que le rapport de la masse d'un joint de grain sur la masse d'un cristal parfait de volume équivalent est égale à 0.85, expérimentalement on reporte des valeurs allant de .75 à .89 (Fitzsimmons et al. 1995). La densité d'un cristal parfait de Cuivre est de 8.96 g/cm^3. Enfin on considère que le volume du joint de grain est décrit par une sphère creuse d'épaisseur w=1.nm.

Approximons la masse d'une dislocation par celle d'une dislocation vis au repos m_{os} donnée par (Bitzek et al. 2005) :

$$m_{dis} \approx m_{os} = \frac{\mu b^2}{4\pi C_t^{\,2}} \ln\left(\frac{R}{r_0}\right) \qquad (5.2.8)$$

Ici r_0 et R sont les bornes supérieures et inférieures d'intégration. La vitesse de l'onde transverse est donnée par :

$$C_t = \sqrt{\frac{\mu^I}{\rho}} \qquad (5.2.9)$$

Ainsi on obtient $m_{dis} = 3.15\, pN \cdot ps^2 / \overset{o}{A}^2$ (Bitzek et al. 2005).

Puisque la vitesse d'une dislocation n'excède pas $C_t / 3$ (sans effet quantum) et que le rapport de la contrainte équivalente sur la contrainte d'écoulement à zéro Kelvin est au maximum égal à .99, on peut alors estimer $v_0 = 0.03$ tel que la vitesse maximale de la dislocation soit égale à cette valeur limite.

Enfin, on suppose un angle de pénétration de 45°, et on fixe le coefficient de proportionnalité à $\iota = 1/2$ et δ est fixé à 40. Remarquons que ce coefficient peut être ajusté puisque l'angle de pénétration dépend de la position relative du plan de glissement par rapport à l'axe longitudinal du joint de grain.

On détermine le module de cisaillement de la phase matrice en reprenant le raisonnement de Wang et al. où les modules d'élasticité de la phase matrice sont estimés sont estimés à partir d'un potentiel d'interaction interatomique (Wang et al. 2003a). Ici on utilise le potentiel de Lennard Jones et on suppose le rapport entre la masse du joint de grain sur la masse d'un volume composé d'un cristal parfait égal à 0.85, ainsi on obtient $\mu^M = 11140 MPa.$.

b) Effet de taille

Les prédictions de la réponse macroscopique du matériau en traction uni axiale à température ambiante et à un taux de déformation de 1.E-3/s sont présentées dans la Figure V-5. Quatre taille de grains sont simulées : 1 micron, 100 nm, 20 nm et 10 nm. En accord avec les travaux expérimentaux de Sanders et al. portant sur le comportement élastique des matériau NC, dans lesquels les auteurs révèlent une diminution du module d'Young variant de 13 à 16 % engendrée par une diminution de la taille de grain allant alors de 20 microns à 26 nm, le modèle prédit une diminution des constantes élastiques macroscopiques de 19% lorsque la taille de grain passe de 1 micron à 20 nm (Sanders et al. 1997a). La légère différence entre les prédictions du modèle et les mesures expérimentales provient du choix du rapport de la masse d'un joint de grain sur la masse d'un cristal parfait de volume équivalent.

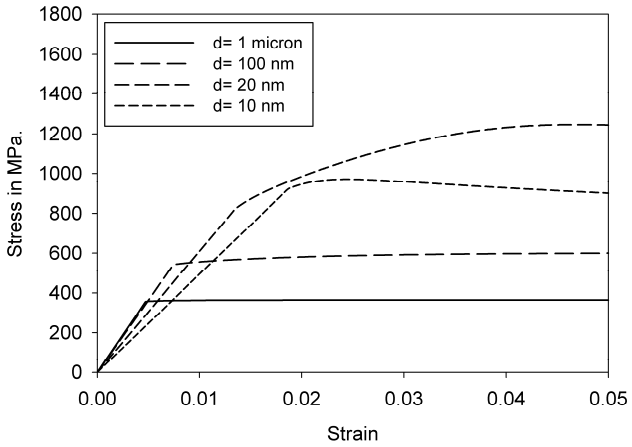


Figure V-5: Courbes contrainte déformation macroscopique à différentes tailles de grain et à un taux de déformation de 1.E-3/s

On rationalise l'assouplissement de la réponse plastique accompagnant une diminution de la taille de grain en observant les réponses des différentes phases présentées dans la Figure V-6 et dans la Figure V-7. Puisque la fraction volumique de la phase matrice devient non négligeable dans le cas de taille de grains inférieures à ~20 nm, on observe que, jusqu'à des tailles de grains de 20 nm, le comportement macroscopique du matériau est très largement dominé par celui de la phase inclusionnaire et en est par conséquent très proche. On notera aussi que dans la Figure V-6, on observe une augmentation conséquente de la limite d'élasticité de la phase inclusionnaire lorsque la taille de grain est inférieure à ~100 nm, ce qui résulte de l'effet croissant des contraintes de résistance au glissement exercées à distance par les joints de grain.

De plus, une comparaison entre les figures ci dessous révèle que la phase matrice est relativement plus dure que la phase inclusionnaire dans le seul cas où la taille de grain est supérieure à ~100 nm. Ce qui est dû au fait qu'une diminution de la taille de grain engendre une augmentation de l'activité des sources

intergranulaires, provoquant un plus grand transfert de masse dans la phase matrice. Ainsi, en diminuant la taille de grain, la déformation maximale de la phase matrice augmente.

Puisque les constantes définissant le mécanisme thermiquement activé d'émission de dislocations varient avec la géométrie des joints de grain, certains joints de grain pourraient avoir un caractère relativement dur par rapport à celui des inclusions alors que d'autres pourrait avoir un caractère mou. Les joints de grains durs seraient alors plus propices à la création de fissure lors de la déformation.

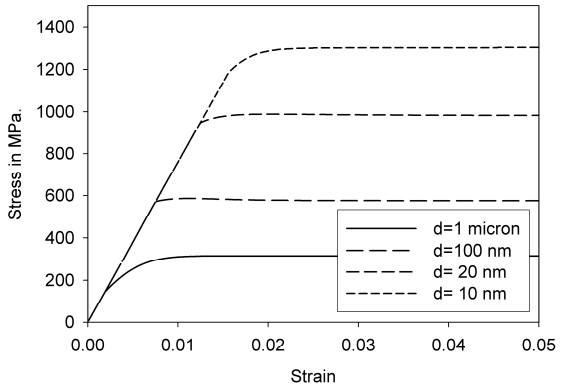


Figure V-6: Courbes contrainte déformation de la phase inclusionnaire à différentes tailles de grains et à un taux de déformation macroscopique de 1.E-3/s

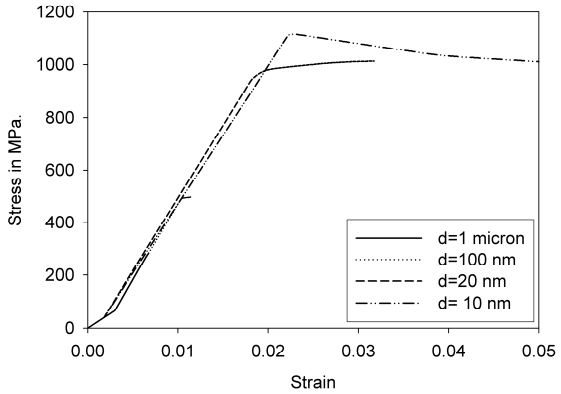


Figure V-7: Courbes contrainte déformation de la phase matrice à différentes tailles de grain et à un taux de déformation macroscopique de 1.E-3/s

Les prédictions du modèle sont comparées à des travaux expérimentaux dans la Figure V-8 (Sanders et al. 1997a; Cheng et al. 2005). Le modèle est en accord quasi parfait avec les mesures expérimentales réalisées sur des matériaux conventionnels. Lorsque l'on compare les prédictions du modèle aux mesures expérimentales de Sanders et al. sur des échantillons de Cuivre ayant des tailles de grains de 110 nm, on remarque alors que les prédictions du modèle sont nettement supérieures aux mesures expérimentales, notamment dans le cas de la limite d'élasticité. Cependant comme présenté dans le chapitre dédié à l'état de l'art, les mesures expérimentales peuvent largement différer d'une étude à l'autre. Le modèle est en accord

quasi parfait avec les résultats de Cheng et al. sur des échantillons de Cuivre de très grande pureté ayant des tailles de grain de 62 nm. On notera tout de même une légère différence au début du régime plastique.

Cependant, l'évolution du coefficient d'écrouissage relevé expérimentalement ne peut être décrite avec le modèle de Cheng introduit dans le présent développement. Il pourrait donc s'avérer utile d'étudier un possible effet de taille dans le coefficient d'écrouissage.

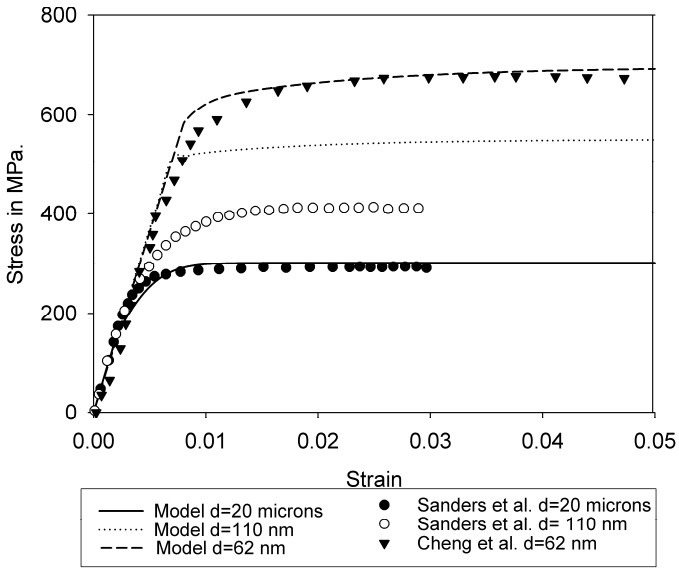


Figure V-8: Comparaison des prédictions du modèle avec les résultats expérimentaux.

Effet du taux de déformation et de la température

Les effets du taux de déformation macroscopique et de la température sont présentés dans la Figure V-9 et dans Figure V-10. Comme dans le cas des matériaux conventionnels, une augmentation du taux de déformation engendre un comportement macroscopique plus dur du matériau. A faibles températures, la probabilité d'avoir un glissement des dislocations est plus faible à chargement équivalent que dans le cas d'une température plus élevée. Ceci est dû au fait que moins d'énergie est apportée par fluctuations thermiques au matériau, ce qui engendre donc un comportement plus dur du matériau.

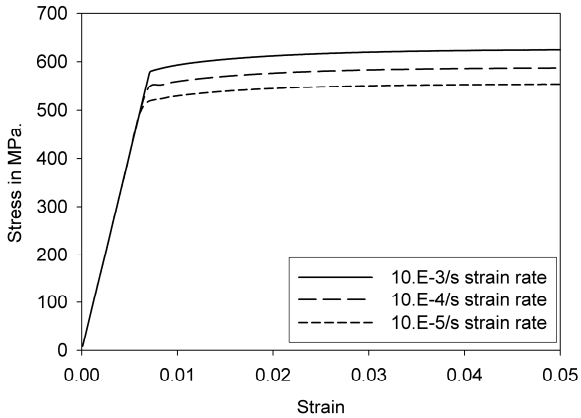


Figure V-9: Courbes contraintes déformation à différents taux de déformation et à un taille de grain de 100 nm

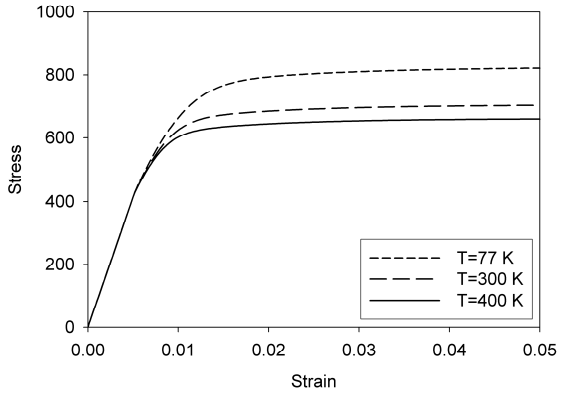


Figure V-10: Courbes contraintes déformation à différentes températures avec d= 100 nm et un tau de déformation de 1.E-3/s

L'effet de taille sur la contrainte d'écoulement est présenté dans la Figure V-11, les prédictions du modèle sont représentées par des lignes et les mesures expérimentales par des points (Chokshi et al. 1989; Gertsman et al. 1994; Valiev et al. 1994; Suryanarayanan Iyer et al. 1999; Wang et al. 2003b; Cheng et al. 2005). On définit la contrainte d'écoulement comme la contrainte à 0.5% de déformation. Trois taux de déformations sont représentés : 1.E-3/s, 1.E-4/s, 1.E-5/s.

Globalement le modèle mène à des prédictions supérieures aux mesures expérimentales mesurées. Ce qui provient du fait que l'on ne connaît pas l'état initial des matériaux. Cependant les tendances du modèle sont très reproductives de celles mesurées. En effet, lorsque l'on diminue la taille de grain de plusieurs microns jusqu'à 100 nm, le modèle prédit avec succès une augmentation linéaire de la contrainte d'écoulement avec l'inverse de la racine carré de la taille de grain, la pente de Hall et Petch prédite est de 0.095 et typiquement la pente de Hall et Petch pour le cuivre est de 0.11.

Lorsque la taille de grain est inférieure à 100 nm, la pente de Hall Petch connaît une augmentation rapidement suivie d'une diminution correspondant à la chute de la loi de Hall et Petch. La taille de grain critique prédite est de 20 nm. On remarque également que la contrainte d'écoulement augmente avec le taux de déformation.

De plus on observe aussi que dans le cas des tailles de grains inférieures à 20 nm le modèle prédit des valeurs égales des contraintes d'écoulement à différents taux de déformation. Cette donnée est due au fait que lorsque la taille de grain est égale à 20 nm, la phase matrice a une influence majeure sur le comportement macroscopique du matériau. En observant le comportement de la phase matrice, on remarque alors que dans le régime plastique, la phase matrice atteint un plateau indépendamment du taux de déformation. Ainsi les contraintes d'écoulement ne seront que très peu dépendantes du taux de déformation.

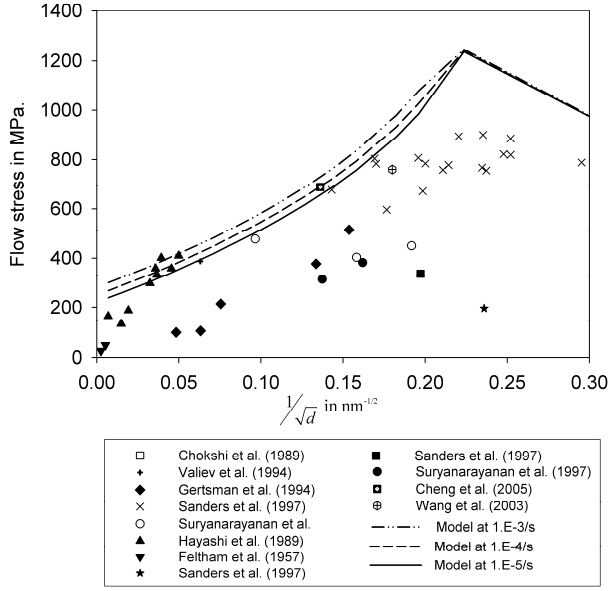


Figure V-11: Evolution de la contrainte d'écoulement avec la taille de grain

Dans la Figure V-12 on présente un graphique de l'évolution des maxima des taux de déformations viscoplastiques équivalents locaux en fonction de la taille de grain. Le taux de déformation macroscopique imposé est de 1.E-3/s. Le taux de déformation viscoplastique équivalent de la phase matrice devient non négligeable lorsque la taille de grain est inférieure à 40 nm et domine la déformation viscoplastique de la phase inclusionnaire lorsque la taille de grain est inférieure à ~20 nm. On peut donc conclure, en prenant en compte l'évolution de la fraction volumique de la phase matrice, que la chute de la loi de Hall et Petch peut être interprétée comme une résultante de changement de caractère relatif des joints de grain qui deviennent alors une phase souple capable de se déformer plus.

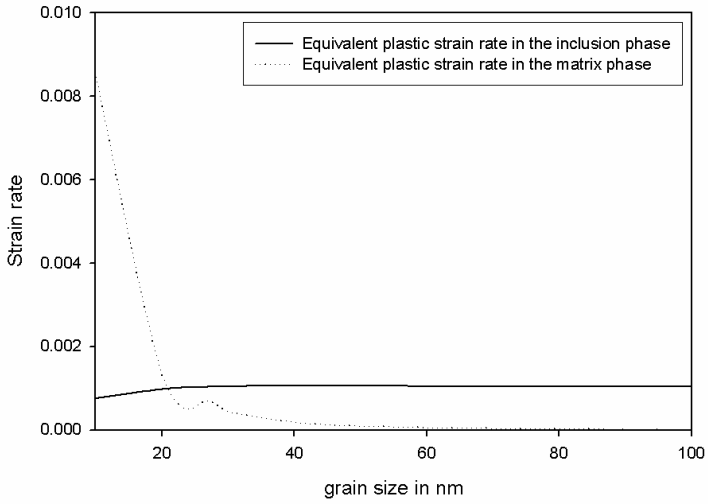


Figure V-12: Evolution des maxima des taux de déformation équivalents locaux en fonction de la taille de grain

c) Comportement en fluage

Dans ce qui suit, les effets de la taille de grain, de la contrainte limite et de la température sur le comportement en fluage sont présentés. Le matériau est chargé en traction à un taux de déformation constant de 1.E-3/s jusqu'à ce que la valeur limite de la contrainte en traction soit atteinte. Dans les figures ci-dessous, la réponse du matériau soumis à une contrainte critique de 400 MPa est présentée. Trois tailles de grain sont simulées ; 100 nm, 60 nm et 20 nm. On observe que le taux de déformation diminue rapidement lorsque la contrainte limite est atteinte, et atteint des valeurs limites de 10 ;E-10/s. Dans le cas où la taille de grain est égale à 20 nm, le matériau ne se déforme pas après que la contrainte limite ait été atteinte ce qui est dû au fait que le matériau est toujours dans son régime plastique et le matériau ne peut donc pas se déformer par des effets visqueux.

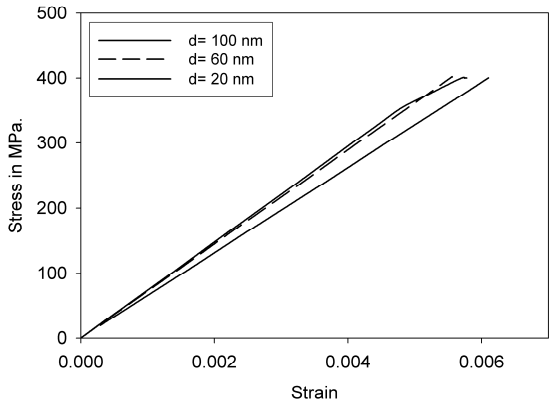


Figure V-13: Courbes contrainte déformation à différente taille de grain et avec un contrainte limite de 400 MPa.

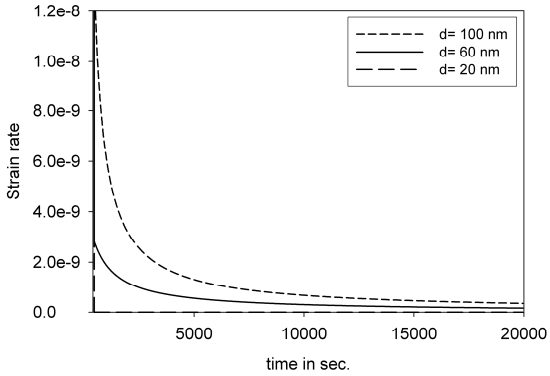


Figure V-14: Evolution du taux de déformation avec le temps à différentes tailles de grain et avec une contrainte limite de 400 MPa.

Les effets de la température et de la contrainte limite sur le comportement en fluage sont présentés dans les figures ci-dessous. Dans le cas de l'effet de la température, trois cas ont été simulés ; T=300,400 et 500 K et la taille de grain est fixée à 100 nm. Logiquement on observe qu'une augmentation de la température mène à une augmentation du taux de déformation. Cependant l'ordre de grandeur des taux de déformation reste très faible. On tire les mêmes conclusions à propos de l'effet de la contrainte appliqué; les simulations sont réalisées avec d=100 nm et T =300 K.

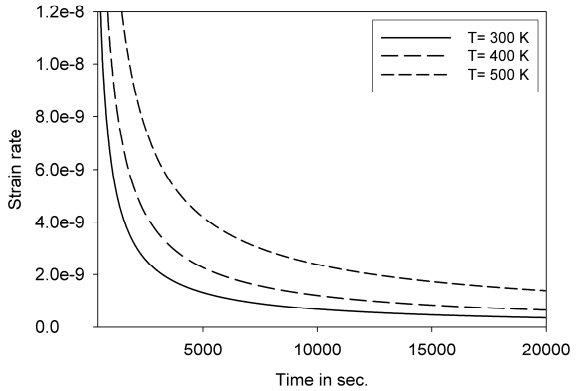


Figure V-15: Evolution du taux de déformation à différente températures avec le temps et avec, d= 100 nm et contrainte= 400 MPa.

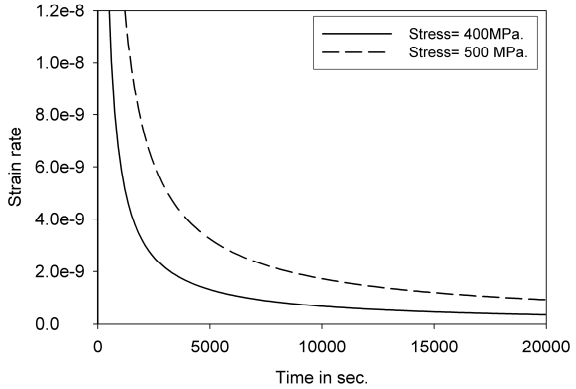


Figure V-16: Evolution du taux de déformation avec le temps à différentes contraintes limite à température ambiant et d= 100 nm

On peut conclure à partir de ces résultats que le comportement en fluage des matériaux NC est semblable à celui des matériaux conventionnels. Ainsi, bien que les joints de grain et les lignes triples soient des chemins préférentiels pour la diffusion de vides, cette étude démontre que le comportement en fluage des matériaux NC est attribué à l'activité des dislocations. Ce modèle est en accord avec de nombreuses études expérimentales qui rapportent des taux de déformation en fluage notablement inférieurs à ceux prédits par l'équation de la diffusion de Coble (Sanders et al. 1997b; Yin et al. 2001)., bien que certains travaux, dont ceux de Cai et al. rapportent des taux de déformations de l'ordre de ceux du fluage de Coble (Cai et al.

2000) où du glissement des joints de grains(Cai et al. 2001). Rappelons ici encore que les travaux de Li et al. réfutent les valeurs données par Cai et al(Li et al. 2004).

d) Discussion:

Le modèle présenté ci-dessus démontre que, conformément aux suggestions de l'équipe de Van Swygenhoven, l'émission de dislocation pourrait effectivement mener au comportement anormal des matériaux NC et UF. Dans ce développement, nous avons mis en exergue les limites des modèles d'écrouissage typique quant à la description de l'effet de taille dans les cristaux. De plus, le modèle montre que le comportement en fluage des matériaux NC et UF ne devrait pas différer sensiblement de celui des matériaux conventionnels.

B. Lien entre la dynamique moléculaire et le modèle continu

Dans cette section nous présentons une méthode d'évaluation des constantes décrivant le mécanisme thermiquement activé d'émission de dislocations par les joints de grains. Dans le modèle précédent, nous faisons l'hypothèse que les sources principales de dislocations inter granulaire sont les «ledges». Cette hypothèse mène à un effet de taille dans la description de la loi de comportement de la phase matrice. Dans cette section nous nous attachons à démontrer la validité de cette hypothèse. La méthode repose sur des simulations du comportement des interfaces de bicristaux réalisées par DM. Avant de présenter les résultats obtenus, nous rappelons brièvement le principe des simulations de DM, le lecteur pourra se référé aux ouvrages de Allen et al. et de Haile pour de plus amples informations (Allen et al. 1987; Haile 1992). Ce travail est réalisé en coopération avec Dr.Spearot qui a réalisé toutes les implémentations numériques.

1. Rappel de dynamique moléculaire

Les simulations de dynamique moléculaire (SM et DM) modélisent le comportement d'un nombre fini d'atomes. Il existe deux types de simulation, les simulations à l'équilibre et les simulations non équilibrées. Dans ces premières on modélise le comportement d'un nombre constant d'atomes, le volume représenté est constant de même que l'énergie totale du système et ce dernier n'interagie pas avec son environnement. On réfère à ces simulations comme NVE. Dans le second type de simulations le système peut interagir avec l'environnement (forces appliquées aux limites…). Ici aussi on différencie deux types de simulations; les simulations NVT où l'énergie cinétique du système est conservée à chaque pas de temps et où les équations de mouvements prennent en compte l'interaction du système avec son environnement en

terme de température à l'aide d'un terme de friction, et les simulations NPT où une cellule reproduite par des conditions de périodicité peut changer de forme et de volume, un terme de friction est introduit pour coupler la pression du système à la pression extérieure.

Dans tout les cas les atomes sont assimilés à des points de masse dont l'interaction avec les atomes l'environnant est régit par un potentiel. Si $U(\boldsymbol{r}_N)$ est le potentiel d'interaction qui dépend de N atomes dont les vecteurs positions sont notés $\boldsymbol{r}_N$, la force que subit un atome noté «i» par les N atomes l'environnant est donnée par:

$$F_i = -\frac{\partial U(\boldsymbol{r}_N)}{\partial \boldsymbol{r}_i} \tag{5.3.1}$$

Il existe de nombreux potentiels décrivant l'interaction d'un atome avec son environnement, le plus connu étant le potentiel de Lennard Jones où seuls une pair d'atomes est considérée (Lennard-Jones 1924). Dans nos simulations, nous utilisons le potentiel dit d'atomes enrobés de Mishin (Mishin et al. 1999). Les potentiels d'atomes enrobés sont écrits sous la forme suivante :

$$U = \sum_i G^i\left(\rho_{ave}^j\left(r^{ij}\right)\right) + \frac{1}{2}\sum_{i,j(j\neq i)} \varphi\left(r^{ij}\right) \tag{5.3.2}$$

Ici G^i est la fonction décrivant l'énergie de l'enrobage, φ est l'interaction d'une pair d'atomes, r^{ij} est la distance entre l'atome i et l'atome j et ρ_{ave}^j est la moyenne de la densité d'électrons provenant de la présence des atomes environnent l'atome «i». Cette dernière est décrite comme suit.

$$\rho_{ave}^j\left(r^{ij}\right) \equiv \sum_{j\neq i} \rho_{ave}^j\left(\boldsymbol{r}^i - \boldsymbol{r}^j\right) \tag{5.3.3}$$

Ainsi, l'évaluation du potentiel d'interaction nécessite le calcul de sommes sur les atomes environnant chaque atome. Le plus souvent on ne considère que les deux couches d'atomes les plus proches de l'atome considéré. Les constantes décrivant le potentiel de Mishin sont évaluées de manière semi empirique de manière à prédire (avec une certaine pondération) les propriétés suivantes: constante de réseau, énergie de cohésion, constantes d'élasticité, énergie de formation de lacunes, fréquence des phonons, énergies des interfaces (1 1 0) (1 0 0) (1 1 1), énergies des structures C.C. H.P.C et diamands, et énergie des défauts d'empilement.

Dans ce travail, afin de simuler de manière la plus réaliste possible le comportement des interfaces, nous avons recours à des simulations de statique moléculaire afin de décrire la structure initiale de l'interface. L'objectif est donc d'obtenir un volume dont l'énergie initiale est minimale. Pour ce faire on positionne les atomes à l'aide d'un algorithme de gradient conjugué. Les détails de cette algorithme sont présentés dans le travail de thèse de Dr. Spearot (Spearot 2005).

Dans un second temps nous réalisons des simulations de dynamique moléculaire dans le but d'évaluer les constantes numériques nécessaires à la description complète du mécanisme d'émission de dislocations. La dynamique moléculaire est régit par les équations de Newton décrivant le mouvement des atomes. Comme nous l'avons précisé ci-dessus, dans le cas des simulations NVT et NPT les équations de Newton sont modifié pour prendre en compte les effet de la température et de la pression extérieure, les détails de ces équations et de leurs implémentations numériques sont elles aussi présentés dans le travail de Dr. Spearot (Spearot 2005). Aussi nous présenterons ici le cas simple où les équations de mouvement ne sont pas modifiées. L'implémentation numérique des cas NPT et NVT est relativement proche de celle présentée ici. Ainsi on décrit simplement l'effet de la force exercé par les atomes environnant l'atome «i» par l'équation suivante:

$$\boldsymbol{F}^i = m\dot{\boldsymbol{v}}^i \tag{5.3.4}$$

Où m est la masse de l'atome et $\dot{\boldsymbol{v}}^i$ est le vecteur accélération de l'atome «i». On intègre numériquement (5.3.4) à l'aide de l'algorithme de Verlet présenté ci-dessous:

$$\boldsymbol{v}^i\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right)=\boldsymbol{v}^i\left(t\right)+\frac{\Delta t}{2m}\boldsymbol{F}^i\left(t\right) \tag{5.3.5}$$

Ici t est le temps, Δt est l'incrément de temps et $\boldsymbol{v}^i\left(t\right)$ est le vecteur vitesse de l'atome «i».La position de l'atome «i» est obtenue par :

$$\boldsymbol{r}^i\left(t+\Delta t\right)=\boldsymbol{r}^i\left(t\right)+\Delta t\cdot\boldsymbol{v}^i\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right) \tag{5.3.6}$$

La détermination des champs de contraintes locaux est nécessaire à l'évaluation des paramètres. Cependant le calcul même des contraintes est encore sujet à débats. Par exemple les travaux de Zhou et al. démontrent que l'expression ci-dessus ne respecte pas la conservation de la quantité de mouvement (Zhou 2003). On extrait les champs de contraintes à l'aide de la définition de Virial et ces derniers sont donnés par :

$$\sigma = \frac{1}{V}\left[\frac{1}{2}\sum_{i}\sum_{i\neq j}\frac{U'}{r^{ij}}r_{\alpha}^{ij}r_{\beta}^{ij} - \sum_{i} m v^{i} v^{i}\right] \qquad (5.3.7)$$

Ici l'indice prime dénote la dérivé spatiale du potentiel d'interaction et r_{α}^{ij} et r_{β}^{ij} sont les distances entre les atomes i et j dans les directions α et β. Notons que l'expression (5.3.7) représente une moyenne temporelle et spatiale des contraintes locales. Ainsi les contraintes calculées varient avec le temps et le volume sur lesquels la moyenne est évaluée.

2. *Les simulations*

Le comportement de l'interface est modélisé en deux étapes. Dans un premier temps on construit numériquement le bicristal, des condition de périodicité sont établis sur toutes les surfaces limites (voir Figure V-17). La hauteur H, égale à 40 fois la constante de réseau λ, est déterminée de manière à minimiser l'effet des images des dislocations, ce qui pourrait influencer la contrainte minimale à l'émission de dislocations. De plus on choisis B=W= 80λ. On s'assure du fait que la structure initiale est réaliste à l'aide d'une simulation de SM dont le principe a été rappelé ci-dessus. On relaxe l'état de contrainte du matériau en effectuant une simulation de DM (NPT modifié) à 10 Kelvin et à une pression de 0 bars. Les équations de mouvement du système sont donné par les travaux de Melchionna (Melchionna et al. 1993).

Afin d'investiguer l'effet des « ledges », on construit deux types d'interfaces; un bicristal parfait et un bicristal contenant un « ledge ». Dans les deux cas l'interface est symétrique est présente un angle d'inclinaison de 53.1° (2 1 0). La direction [1 0 0] est l'axe d'inclinaison utilisé pour définir l'angle d'inclinaison.

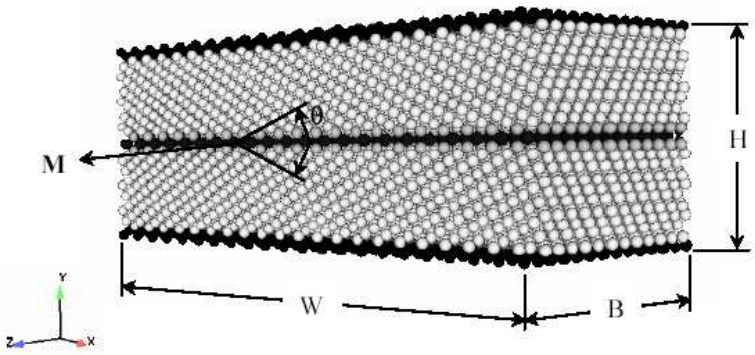


Figure V-17: Représentation numérique du bicristal parfait

Dans un second temps on réalise des simulations de DM sur les deux structures. On impose des condition de traction sur les faces parallèles à l'interface en appliquant des pressions de 5, 6, 5.5 et 7 GPa. De plus, on impose des contraintes de 0 Pa. aux faces perpendiculaires à l'interface.

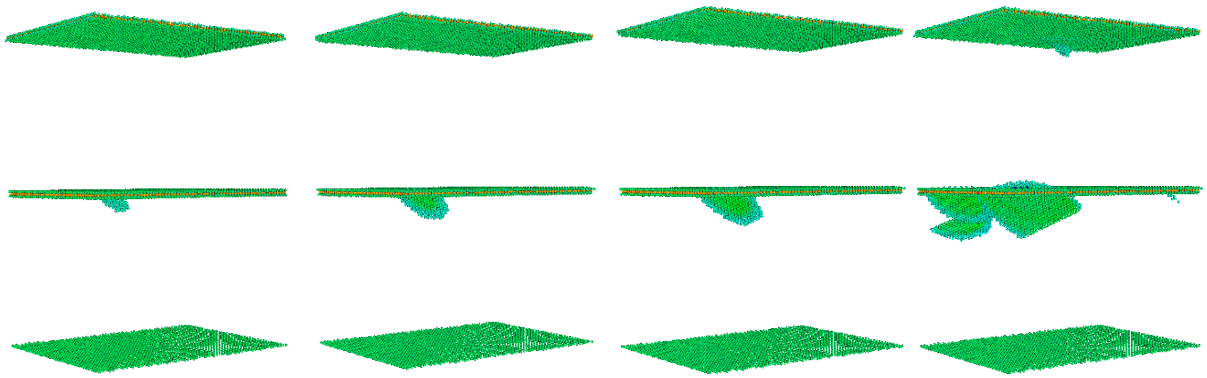
L'enthalpie libre d'activation et la contrainte limite d'émission de dislocations sont déterminées de la manière suivante. Dans le cas de la contrainte d'émission, on calcule la projection de la contrainte sur le plan de glissement à l'aide du facteur de Schmidt dès lors qu'une dislocation est émise. Pour être rigoureux, les simulations devraient être réalisée à 0 K, cependant la nature thermiquement activée de l'émission de dislocation engendrerait alors un nombre conséquent de dislocations émises et il serait alors impossible d'isoler une unique dislocation.

Dans le cas de l'enthalpie libre d'activation, deux étapes sont nécessaires. Dans un premier temps on définit un volume dont l'énergie totale est évaluée à chaque pas de calcul. Dans un second temps on évalue à quel temps la dislocation émise a atteint la configuration instable à énergie motrice positive. Pour ce faire nous procédons par itération, nous relâchons les contraintes à différents pas de temps jusqu'à ce que l'on observe que la dislocation émise ne revient pas dans l'interface source après la relâche des contraintes. Rappelons ici que nous ne sommes intéressée que dans l'émission de la première dislocation partielle de Schokley.

3. Résultats

a) Bicristal parfait

Les simulations réalisées sur un bicristal parfait permettent de visualiser l'émission de dislocations par l'interface (voir Figure V-18, seuls les atomes définissant les interfaces sont représentés). La contrainte critique d'émission obtenue est de 2.58 GPa. Notons que l'ordre de grandeur est consistent avec celui choisis dans les paramètres utilisés dans le modèle présenté dans la section précédente.



(a) tstep = 80,800 (b) tstep = 80,900 (c) tstep = 81,000 (d) tstep = 81,700

Figure V-18:Nucléation d'une boucle de dislocation à partir d'un interfaceΣ5 (210) 53.1^{o} interface à 10K.

L'évaluation de l'enthalpie libre d'activation est elle plus délicate. Dans la Figure V-19 (image de gauche), on observe l'évolution de l'excès d'énergie par rapport à l'énergie d'un cristal parfait de trois volumes (noté V) différents dans lesquels on calculera la différence entre l'énergie du système avant et après émission. Une augmentation de V engendre logiquement une augmentation de l'excès d'énergie ce qui est du au fait qu'un nombred'atomes plus important est considéré. On observe que l'énergie du volume augmente de manière quasi linéaire jusqu'à 40000 pas de temps, la pente diminue lorsque le temps de calcul est supérieur à 40000 pas de temps. Cette dernière augmente rapidement avant l'émission de la première dislocation. Une fois la première dislocation partielle émise l'excès d'énergie du système diminue. L'évaluation de l'enthalpie libre d'activation est délicate. Nous supposons ici que cette dernière peut être définit comme la différence de deux mesures. La première étant la différence entre l'énergie initiale du volume considéré et l'énergie du volume au pas de temps auquel la première dislocation partielle de Shockley est émise. La seconde mesure est la différence entre l'énergie initiale d'un même volume contenant uniquement des atomes d'un cristal ayant la même orientation relative par rapport aux conditions aux limites. Ceci nous permet de nous affranchir de l'énergie cinétique des atomes du volume qui ne sont que très peu influencé par la dislocation.

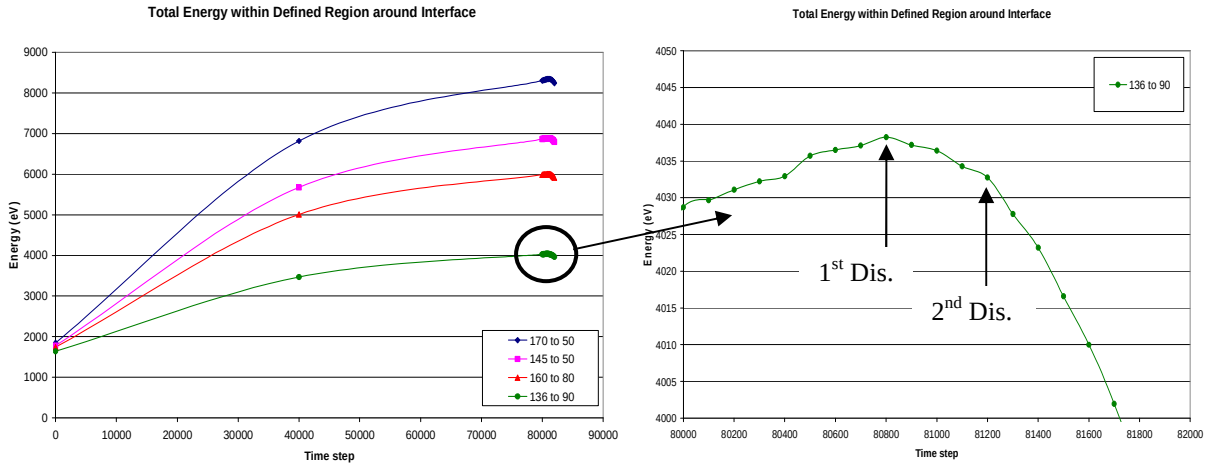


Figure V-19: Excès d'énergie dans différent volumes calcul pendant la simulation de traction à 6.1 GPa.

b) Effet d'un ledge

Les simulations incorporant un ledge dans la structure initiale du bicristal permettent elles aussi de simuler l'émission d'une dislocation par le joint de grain (voir Figure V-20). La contrainte critique d'émission de la dislocation partielle est évaluée à 1.96 GPa. Les joints de grains contenant des ledges constitueraient donc des sources de dislocations plus favorables que les joints de grains parfaits. Notons ici qu'un seul angle de désinclinaisons est considéré. Ainsi pour d'autres angles d'inclinaisons les sources de dislocations les plus favorables pourraient ne pas être les ledges le résultat est donc à vérifié pour d'autres géométries de l'interface. Notons que ces simulations révèlent que contrairement aux hypothèses de Li, les ledges ne sont pas de simples donneurs de dislocations mais de véritables sources de dislocations. Ainsi le ledge est encore présent après émission de la seconde dislocation partielle de Shockley. Ceci confirme la validité de l'hypothèse formulée ci-dessus où l'annihilation des ledges post émission est ignorée. Notons aussi que les dislocations sont émises aux limites du ledge. Ainsi la hauteur du ledge, définit comme le nombre de plans atomiques supplémentaire dans le ledge, pourrait influencer le mécanisme d'émission. Enfin, le modèle de Li, prédisant l'annihilation du ledge post émission de la dislocation pourrait être exact dans le cas où le ledge repose sur un plan de glissement favorable du cristal.

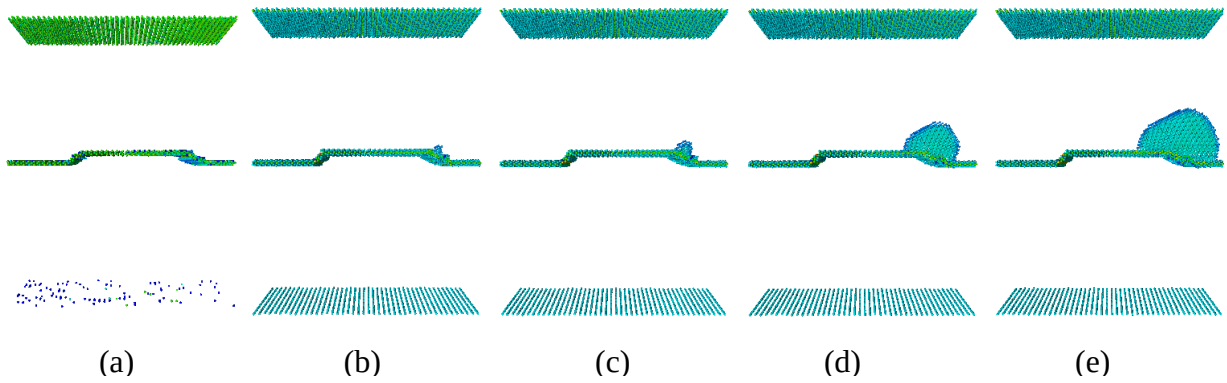


Figure V-20: Nucléation d'une dislocation partielle à partir d'un ledge. Simulations à 10 K.

Dans la Figure V-21, nous présentons les mesures des énergies de différents volumes choisis en fonction du temps. La courbe excès d'énergie/ temps suit la même tendance que dans le cas précèdent où l'interface ne comprend pas de ledge. Ainsi les valeurs des enthalpie libres d'activations devrait être sensiblement les même dans les deux cas (interface avec ledges et interface parfaite).

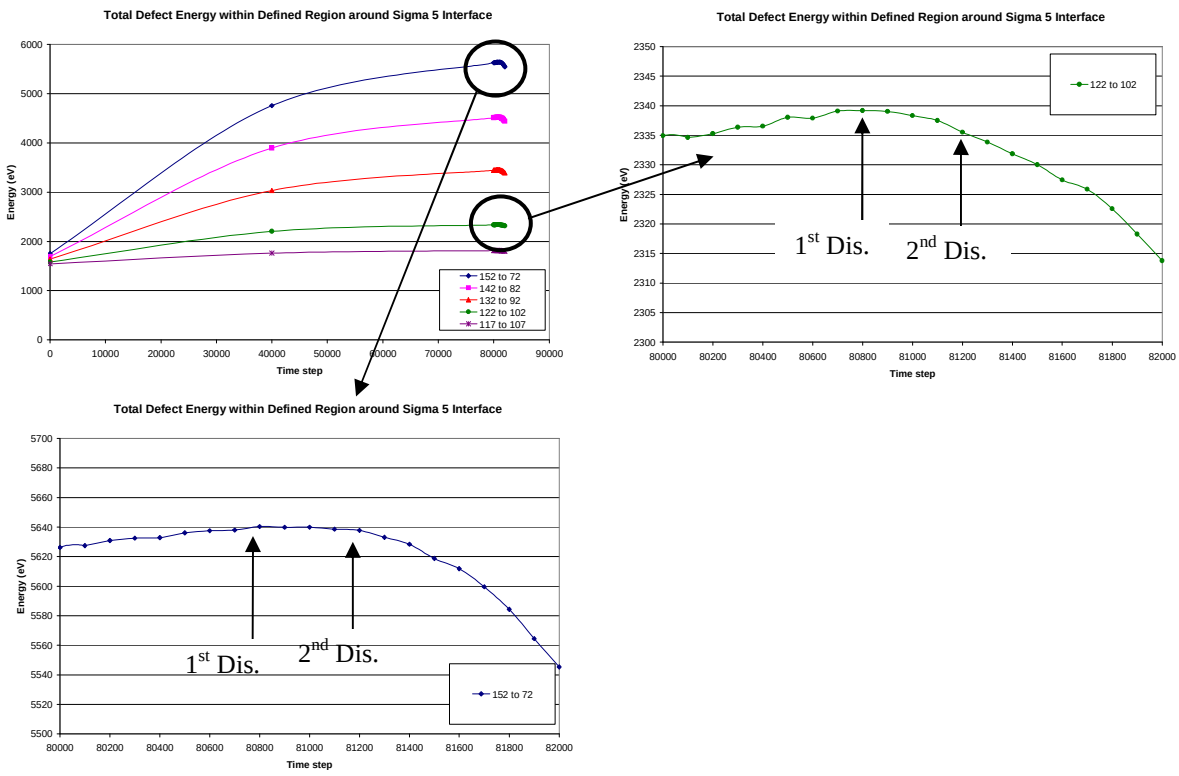


Figure V-21: Evolution de l'énergie des volumes choisis en fonctions du temps, à 6.1 GPa.

c) Comparaison des sources de dislocations

Dans la Figure V-22, nous présentons les mesures des enthalpies libres d'activation par unité de volume (représentées par des triangles noirs) dans le cas d'une interface parfaite (figure du haut) et dans le cas d'une interface contenant un ledge (figure du bas). Les cercles noirs représentent les mesures des maximum des différences d'énergies de V par unité de volume, et les cercles blancs représentent les mesures de l'énergie par unité de volume d'un cristal parfait soumis aux memes conditions aux limites.

Nous observons alors qu'à partir d'un certain volume de calcul, les mesures de l'enthalpie libre d'activation par unité de volume convergent. De plus une comparaison des deux figures présentées ci-dessus révèle que l'estimation de l'enthalpie libre d'activation dans le cas d'un interface parfaite est environ 2.5 fois plus grande que dans le cas d'une interface contenant un ledge. Ceci signifie donc qu'à température et état de contrainte donnés, une interface contenant un ledge nécessitera un apport d'énergie par fluctuations thermique moins conséquant qu'une interface parfaite. Les « ledges » peuvent donc etre considérés comme sources principales de dislocation intergranulaires.

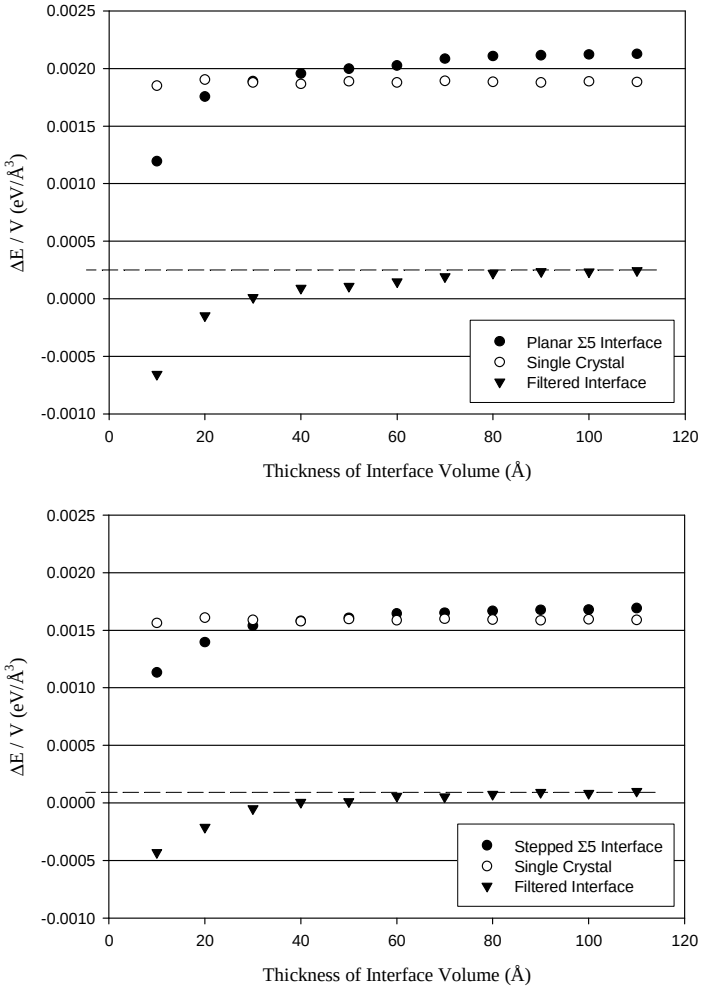


Figure V-22: Evolution des mesures d'énergies en fonction des volumes de calcul

C. Application éléments finis

Dans cette section nous introduisons les lois de comportements développés ci-dessus dans un code élément fini (Abaqus). Ces simulations nous permettent d'évaluer l'importance de l'orientation des joints de grains par rapport aux directions des conditions limites imposées ainsi que l'influence des lignes triples que nous avions ignoré jusqu'alors. L'étude par éléments finis se déroule en deux étapes. La première étape consiste à développer deux subroutines UMAT, programmées en FORTRAN, dans le code Abaqus et à vérifier la concordance avec les formules analytiques. La seconde étape consiste à créer numériquement une géométrie satisfaisante pour évaluer de manière la plus réaliste possible le comportement des joints de grains.

Afin de vérifier la concordance entre les lois de comportements implémentées dans la subroutine UMAT et les lois analytiques, nous définissons un volume cubique constitué d'un unique élément de type C3D8. Un déplacement est imposé sur la surface positive perpendiculaire à l'axe des 'z'. Ce déplacement est établi de manière linéaire avec le temps. De cette manière, on impose un taux de déformation de 0.001/s aux limites. Des conditions de symétrie sont imposées sur toutes les surfaces limites passant par l'origine.

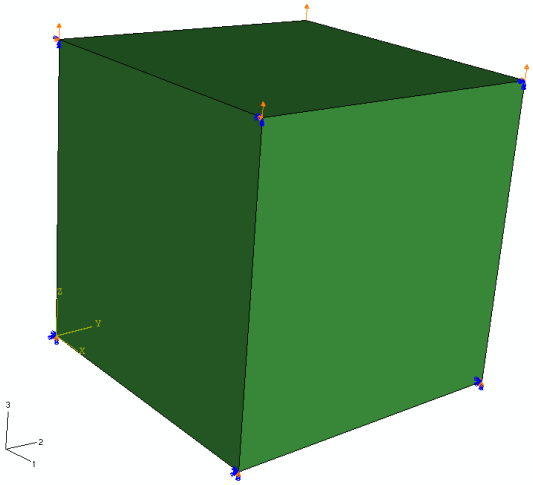
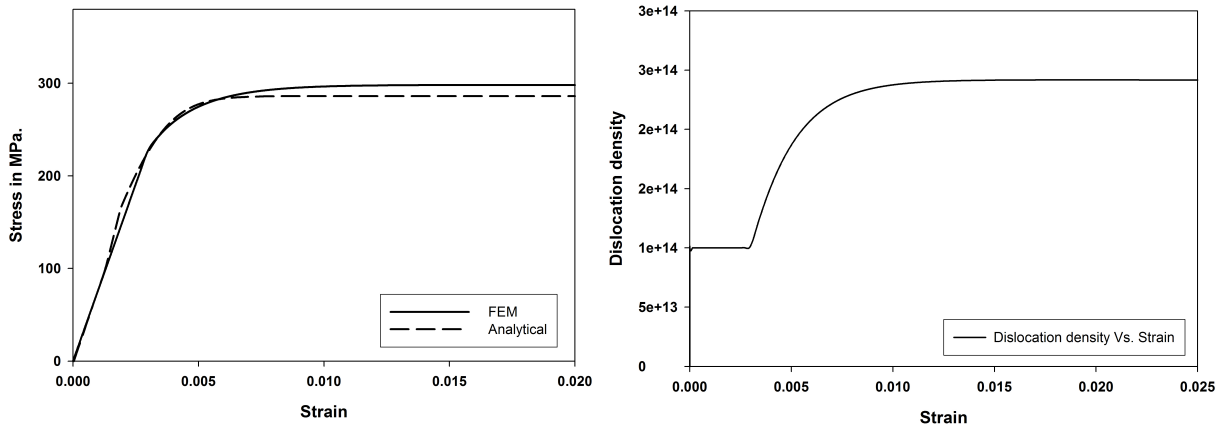


Figure V-23: Volume utilisé pour la vérification de la loi de comportement des inclusions.

Les Figure V-24 a) et b) et la Figure V-25 se réfèrent au comportement des inclusions et présentent respectivement, une comparaison entre les courbes contraintes déformation de la phase inclusion prédite par les éléments finis et par les formules analytique avec une taille de grain de 1micron à un taux de déformation de 1.E-3/s, l'évolution de la densité de dislocation avec la déformation prédite par les éléments finis avec une taille de grain de 1 micron et un taux de déformation de 1.E-3/s et différentes courbes contraintes déformation de la phase inclusion avec des tailles de grains de 1 micron, 100 nm et 20 nm lorsqu'un taux de déformation de 1.E-3/s est imposé aux limites. Nous observons que les prédictions des éléments finis sont en coïncidence quasi parfaite avec les formules analytique. L'évolution de la densité de dislocation est correcte dans la mesure où la densité de dislocations est constante lorsque le comportement de la phase inclusion est élastique. Puis, lorsque la plasticité commence, la densité de dislocations connaît une augmentation rapide engendrée par la très forte domination du stockage de dislocations par rapport au mécanisme d'annihilation. Enfin, la densité de dislocation augmente moins rapidement lorsque l'annihilation des dislocations devient non négligeable. La sensibilité à la taille de grains des prédictions par éléments finis est elle aussi représentative dans la mesure où l'on obtient une pente de Hall et Petch de 0.103 très proche des valeurs expérimentales de 0.11.



a) **b)**

Figure V-24: a) Comparaison entre les courbes contraintes déformation prédite par les éléments finis et par les caluls analytiques avec d=1micron, b) Evolution de la densité de dislocation avec la déformation (éléments finis).

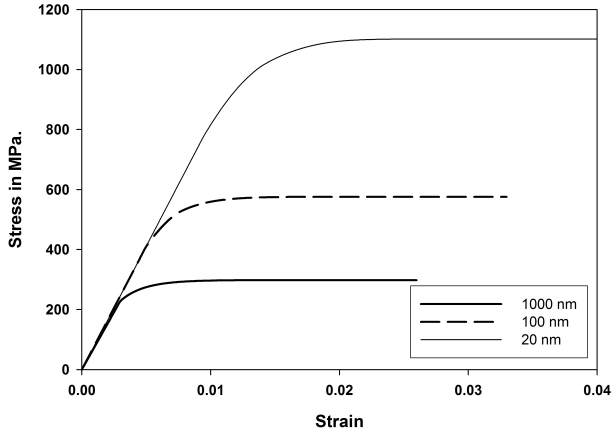


Figure V-25: Courbes contraintes déformation prédite par les éléments fini à différents taille de grains.

Pour des raisons de concision, les courbes présentés ci-dessus ne sont pas présentées dans le cas de la phase matrice. Cependant les résultats obtenus sont de même qualité que ceux présentés précédemment. Notons que le comportement de la phase matrice dont le taux de déformation viscoplastique équivalent est donné par (5.1.27), est modifié par:

$$\dot{\varepsilon}_{eq}^{M} = \frac{\chi}{d^3}\varpi \exp\left(-\frac{\Delta G_0\left(\theta_{mis}\right)}{k_B T}\left(1-\left(\frac{\sigma_{eq}^{M}}{\sigma_c^{M}\left(\theta_{mis}\right)}\right)^{p}\right)^{q}\right) \tag{5.4.1}$$

Avec $\varpi = 0.8$. Cette approximation est due au fait que le calcul du rapport de la contrainte équivalente de l'inclusion sur la contrainte critique d'écoulement à zéro Kelvin de la phase inclusion n'est pas possible lors

du calcul du comportement de la phase matrice. Ainsi, nous surestimons la contribution de la déformation viscoplastique de la phase matrice, ce qui engendre donc un comportement plus souple que celui prédit par le modèle présenté dans la section dédiée au comportement de la phase matrice.

Les lois de comportements sont programmées en langage FORTRAN à l'aide de la méthode de prédiction/correction (pour l'incrément de déformation viscoplastique). La méthode de Newton Raphson a été implémentée afin d'évaluer la densité de dislocation à chaque pas de temps. Les subroutines UMAT nécessitent l'évaluation de la matrice Jacobienne des champs de contraintes, dont l'expression est présentée dans l'annexe, afin de prédire le pas de calcul optimal.

La seconde étape de cette analyse par éléments finis consiste à simuler le comportement de quatre grains carrés de taille 20nm dans un premier temps, puis 10 nm dans un second temps. Les grains sont enrobés de joints de grain d'épaisseur 1nm. L'analyse est réalisée en 2D où nous faisons l'hypothèse des contraintes planes. Cette approximation est faite dans le but de diminuer les pas de temps de calculs. Les éléments sont de type CPS4. La surface représentative et les conditions aux limites sont présentées dans la Figure V-26. Des conditions de symétries sont imposées sur les lignes passant par l'origine parallèles à l'axe des 'x' et à l'axe des 'y'. Un déplacement évoluant de manière linéaire avec le temps est imposé sur la ligne limite parallèle à l'axe des 'x' ne passant pas par l'origine de sorte à imposé un taux de déformation en traction de 1.E-3/s.

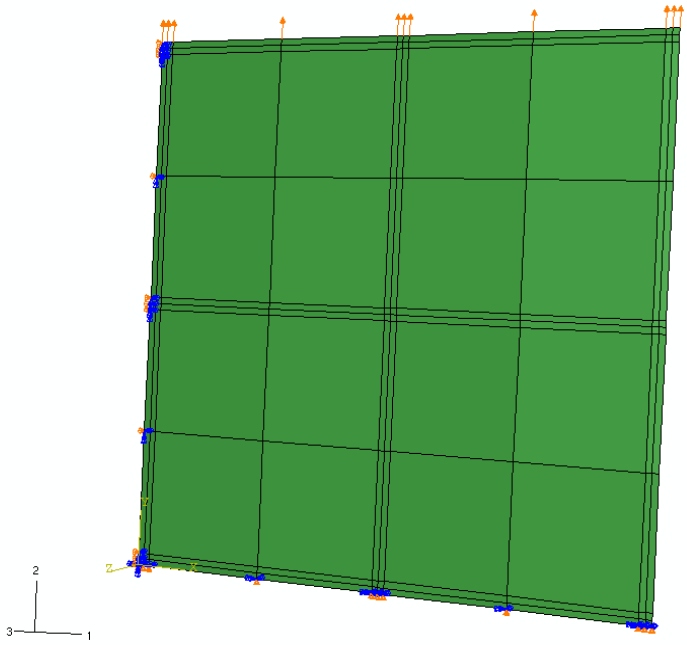
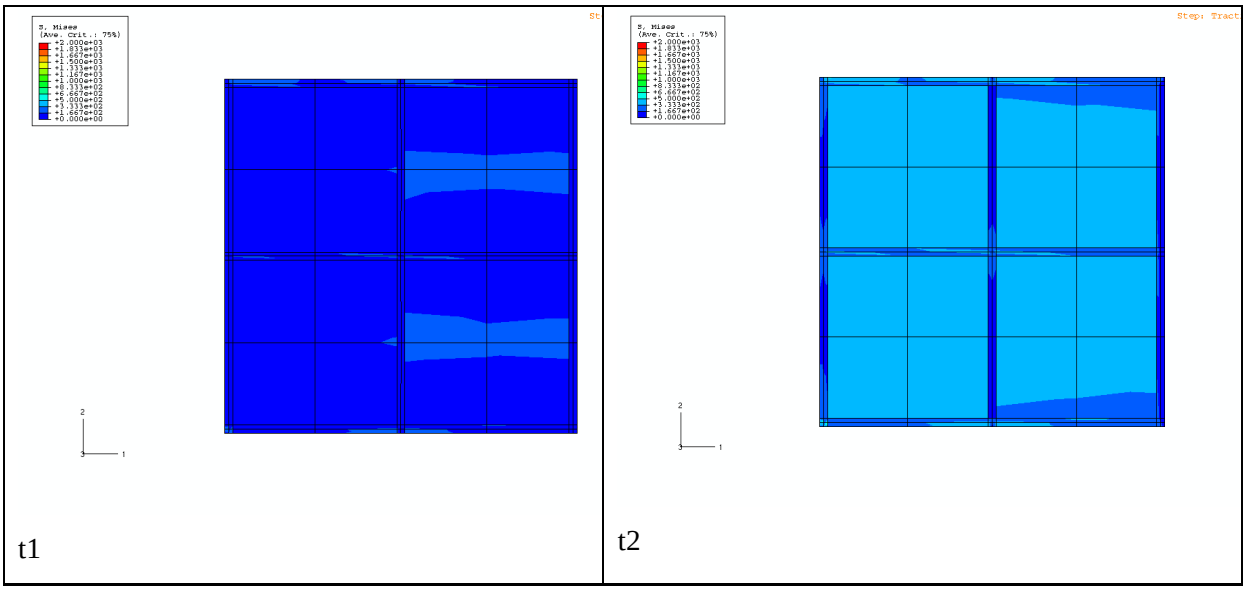


Figure V-26: Surface représentative utilisée et conditions aux limites.

La Figure V-27 présente les contrainte de Von mises dans la surface représentative à différents temps (t1<t2…<t6). On peut alors observer que la plasticité débute dans les cœurs de grains suite aux mécanismes d'évolution de la densité de dislocation. Les contraintes dans les joints de grains parallèles à la surface de traction sont de même ordre que celle dans les joints de grains alors que les contraintes dans les joints de grains perpendiculaire à la surface de traction sont constamment inférieure à celles des joints de grains perpendiculaire à la surface de traction. A t5 les cœurs de grains ont atteint l'état de saturation des contraintes et la plasticité continue principalement dans les joints de grains dont le comportement plastique est plus souple que celui des cœurs de grains.

Les simulations révèlent aussi que de fortes concentrations de contraintes se développent dans les zones d'intersection de plus de deux grains. On note des contraintes de Von Mises de 2GPa. dans ces zones alors que la contrainte de Von Mises dans les cœurs de grains n'atteignent que des valeurs de 1.2 GPa. Ces concentrations de contraintes ne sont pas liées à la géométrie des grains. D'autres simulations où les grains ont une géométrie hexagonale et où les intersections des lignes décrivant les hexagones sont arrondies, révèlent des concentrations de contrainte du même ordre de grandeur. De plus, rappelons que les niveaux de contraintes dans les joints de grains sont sous estimé dans ces simulations par éléments finis.



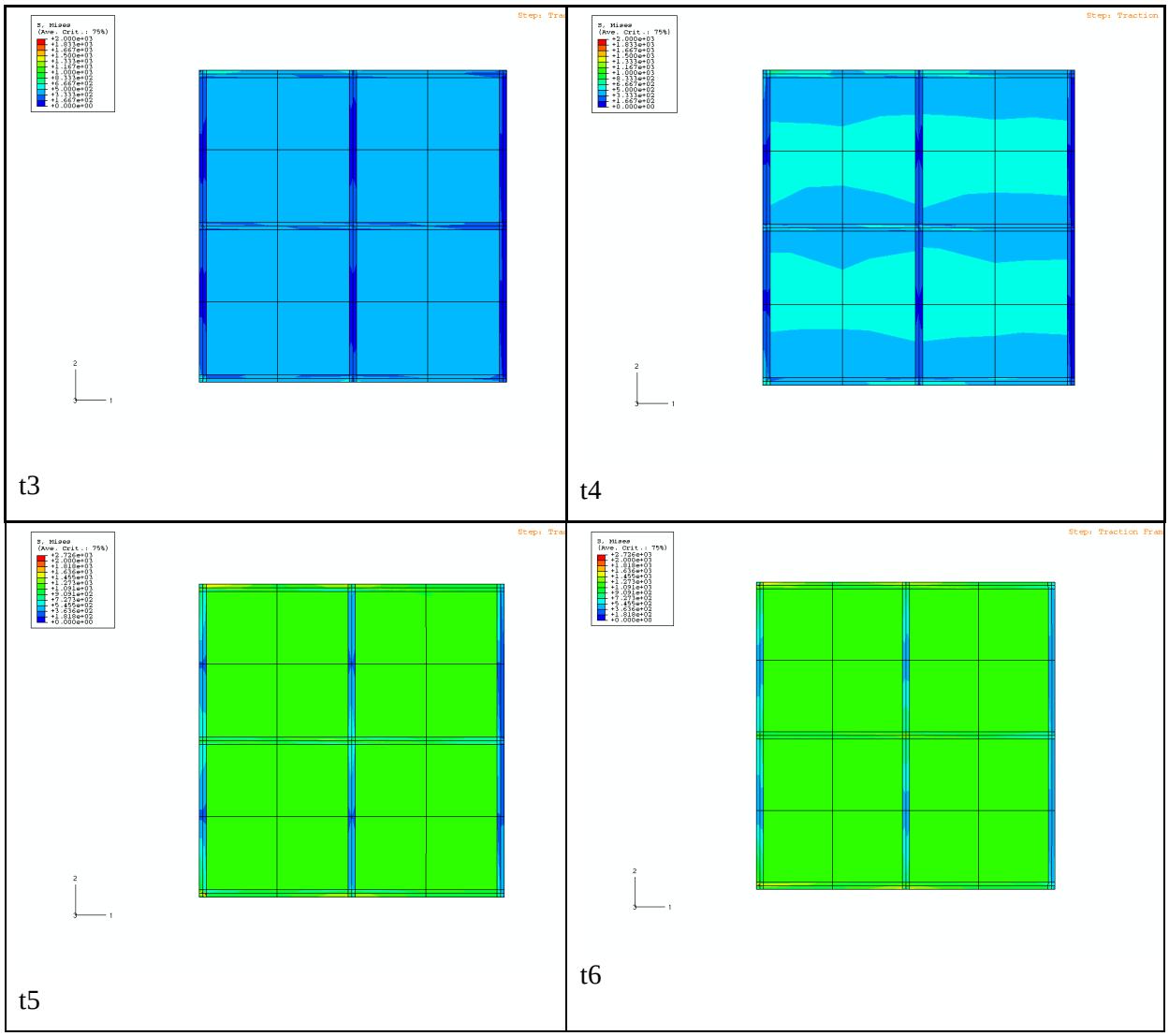
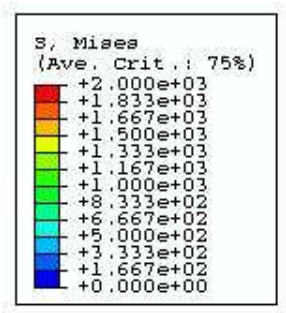


Figure V-27: Images représentant les contraintes de Von mises à différents pas de temps.



Légende

Les memes simulation réalisées avec des tailles de grains de 10nm révèlent des comportements semblables aux résultats présentés ci-dessus. Cependant les concentrations de contraintes au niveau des joints de grains sont nettement plus prononcées (de l'ordre de ~10GPa.).

1. Discussion

Rappelons ici que les simulations présentées ci-dessus présentent des limitations. Tout d'abord la géométrie des échantillons devrait être décrite avec plus de raffinement, ce qui entraîne une augmentation notable des temps de calcul. Des conditions de périodicité sur les surfaces limites s'avéreraient utiles afin de pouvoir comparer les prédictions des simulations éléments finis et celle des modèles basés sur les schémas d'homogénéisation.

De plus, la loi de comportement décrivant le comportement des joints de grains n'est précise que dans le cas des joints de grains de type $\Sigma 5$. Les DM peut s'avérer être un outil précieux afin de permettre une modélisation plus rigoureuse. Afin de remédier à ces simulations un modèle basé sur la plasticité cristalline est développé au chapitre suivant.

Références partielles

Allen, M. P. and D. J. Tilsdesley (1987). Computer Simulations of Liquids. Oxford, Clarendon Press.

Berbenni, S., V. Favier, et al. (2004). "Micromechanical modeling of the elastic viscoplastic behavior of polycrystalline steels having different microstructures." Materials science and engineering **A372**: 128-136.

Bitzek, E. and P. Gumbsch (2005). "Dynamic aspects of dislocation motion: atomistic simulations." Materials Science and Engineering A **400-401**: 40-44.

Cai, B., Q. P. Kong, et al. (2001). "Creep behavior of cold-rolled nanocrystalline pure copper." Scripta Materialia **45**(12): 1407-1413.

Cai, B., Q. P. Kong, et al. (2000). "Low temperature creep of nanocrystalline pure copper." Materials Science and Engineering A **286**(1): 188-192.

Capolungo, L., M. Cherkaoui, et al. (2005a). "On the elastic-viscoplastic behavior of nanocrystalline materials." Journal of the mechanics and physics of solids **submitted**.

Capolungo, L., M. Cherkaoui, et al. (2005b). "A self consistent model for the inelastic deformation of nanocrystalline materials." Journal of engineering materials and technology **XX**: XXXX.

Cheng, S., E. Ma, et al. (2005). "Tensile properties of in situ consolidated nanocrystalline Cu." Acta materialia **53**: 1521-1533.

Chokshi, A. H., A. Rosen, et al. (1989). "On the validity of the hall-petch relationship in nanocrystalline materials." Scripta Metallurgica **23**(10): 1679-1683.

Estrin, Y. (1998). "Dislocation theory based constitutive modelling: foundations and applications." Journal of the materials processing technology **80-81**: 33-39.

Estrin, Y. and H. Mecking (1984). "A unified phenomenolgical description of work hardening and creep based on one parameter models." Acta metallurgica **32**: 57_70.

Fitzsimmons, M. R., A. Roll, et al. (1995). "The magnetization of a grain boundary in nickel." Nanostructured Materials **6**(5-8): 539-542.

Gertsman, V. Y., R. Birringer, et al. (1994). "On the structure and strength of ultrafine-grained copper produced by severe plastic deformation." Scripta Metallurgica et Materialia **30**(2): 229-234.

Gutkin, M. Y., I. A. Ovid'Ko, et al. (2003). "Transformation of grain boundaries due to disclination motion and emission of dislocations pairs." Materials science and engineering **A339**: 73-80.

Haile, J. M. (1992). Molecular Dynamics Simulation; Elementary Methods. New York, Wiley.

Kocks, U. F. (1976). "Laws for work hardening and low temerature creep." Transactions of the ASME: 76-85.

Kocks, U. F., A. S. Argon, et al. (1975). "Thermodynamics and kinetics of slip." Progress in Materials Science **19**: 1-291.

Lennard-Jones, J. E. (1924). "The determination of molecular fields.I. From the variation of the viscosity of a gas with temperature." Proceedings of the Royal Society of London A **106**: 441.

Li, J. C. M. (1963). "Petch relation and grain boundary sources." Transactions of the metallurgical society of AIME **227**: 239.

Li, Y. J., W. Blum, et al. (2004). "Does nanocrystalline Cu deform by Coble creep near room temperature." Materials science and engineering **A 387-389**: 585-589.

Melchionna, S., G. Ciccotti, et al. (1993). "Hoover NPT dynamics for systems varying in shape and size." Molecular Physics **78**: 533-544.

Mishin, Y., D. Farkas, et al. (1999). "Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations." Physical Review B **59**: 3393-3407.

Nes, E. (1997). "Modelling of work hardening and stress saturation in FCC metals." Progress in materials science **41**: 129-193.

Sanders, P. G., J. A. Eastman, et al. (1997a). "Elastic and tensile behavior of nanocrystalline copper and palladium." Acta metallurgica **45**: 4019-4025.

Sanders, P. G., M. Rittner, et al. (1997b). "Creep of nanocrystalline Cu, Pd, and Al-Zr." Nanostructured Materials **9**(1-8): 433-440.

Spearot, D. E. (2005). Atomistic Calculations of Nanoscale Interface Behavior in FCC metals. Woodruff school of mechanical engineering. Atlanta, Georgia Institute of Technology**:** 276.

Spearot, D. E., K. I. Jacob, et al. (2005). "Nucelation of dislocations from [001] bicrystal interfaces in aluminum." Acta materialia **xxx**: xxx-xxx.

Suryanarayanan Iyer, R., C. A. Frey, et al. (1999). "Plastic deformation of nanocrystalline Cu and Cu-0.2 wt.% B." Materials Science and Engineering A **264**(1-2): 210-214.

Taylor, G. I. (1934). "The mechanism of plastic deformtion of crystals: Part 1 theoretical." Proceedings of the Royal Society A **CXLV**(362-387).

Valiev, R. Z., E. V. Kozlov, et al. (1994). "Deformation behaviour of ultra-fine-grained copper." Acta Metallurgica et Materialia **42**(7): 2467-2475.

Wang, G.-F., X.-Q. Feng, et al. (2003a). "Interface effects on effective elastic moduli of nanocrystalline materials." Materials Science and Engineering A **363**(1-2): 1-8.

Wang, Y. M., K. Wang, et al. (2003b). "Microsample testing of nanocrystalline copper." Scripta materialia **48**: 1581-1586.

Wei, Q., S. Cheng, et al. (2004). Materials science and engineering **381**: 71.

Yin, W. M., S. H. Whang, et al. (2001). "Creep behavior of nanocrystalline nickel at 290 and 373 K." Materials science and engineering **A301**: 18-22.

Zhou, M. (2003). "A New Look at the Atomic Level Virial Stress -- On Continuum Molecular System Equivalence." Proceedings of the Royal Society of London A **459**: 2347-2392.

Chapitre VI. Modèle basé sur la plasticité cristalline

Au chapitre précédent nous avons montré à l'aide d'un modèle relativement simple que le mécanisme d'émission de dislocations par les joints de grain joue un rôle important dans l'adoucissement du comportement viscoplastique des matériaux NC. Comme rappelé dans les conclusions du chapitre V, la modélisation proposée alors ne tiens pas compte des différents angles d'inclinaisons des joints de grains ni de la texture du matériau. Ainsi, dans ce chapitre, nous choisissons une approche basée sur la plasticité cristalline, où les mécanismes de déformation sont décris localement sur chaque système de glissement, ce qui a terme nous permettra de décrire avec une grande précision l'effet du mécanisme d'émission de dislocations tout comme l'effet du mécanisme de pénétration de dislocations dans les joints de grains. L'étude est limitée au cas de sollicitations monotoniques dans le régime quasistatique. Ce chapitre est un travail en cours de développement et seul le formalisme de l'approche envisagée est présenté ici.

Avant de présenter les détails de cette nouvelle approche, le formalisme de la plasticité cristalline est rappelé dans la section suivante. Notons dès à présent que les travaux de Cheong et al. ont démontré que cette approche permet de simuler l'effet de taille dans le comportement des matériaux conventionnels par l'implémentation des lois de comportements dans un code de calcul par éléments finis (Abaqus).

A. Rappel

Typiquement, l'approche cristalline se base sur la décomposition du gradient de déformation. Cette dernière peut être additive (Nemat-Nasser 1979) ou multiplicative. On décompose le gradient de déformation en une partie élastique et une partie inélastique. Généralement, l'endommagement du matériau est décris dans le gradient de déformation inélastique. Dans le cas de la décomposition multiplicative, l'écriture la plus souvent utilisée, proposée par Asaro et Rice, est la suivante (Asaro et al. 1977):

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}^{e}\boldsymbol{F}^{p} \qquad (6.1.1)$$

Où $\boldsymbol{F}^{e}$ et $\boldsymbol{F}^{p}$ dénotent respectivement les gradients de déformation élastique et inélastique. Clayton et McDowell proposent eux une décomposition multiplicative différente $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}^{e}\boldsymbol{F}^{i}\boldsymbol{F}^{p}$, où $\boldsymbol{F}^{i}$ représente l'endommagement du matériau (Clayton et al. 2003). Le taux du gradient de déformation inélastique dépend de l'effet du mécanisme de déformation sur chaque système de glissement et s'écrit donc:

$$\dot{\boldsymbol{F}}^{p} = \left\{ \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} \boldsymbol{m}^{\alpha} \otimes \boldsymbol{n}^{\alpha} \right\} \boldsymbol{F}^{p} \tag{6.1.2}$$

Ici, α dénote le système de glissement (il y en a 12 dans le cas du cuivre). $\dot{\gamma}^{\alpha}$, $\boldsymbol{m}^{\alpha}$ et $\boldsymbol{n}^{\alpha}$ représentent respectivement le taux de déformation viscoplastique sur le système de glissement α, la normale du plan de glissement et la direction de glissement correspondante. Le tenseur des contraintes de Piola Kirchoff II, qui est le conjuguée de la déformation élastique, est donné par:

$$\boldsymbol{T} = L \square \boldsymbol{E}^{e} \tag{6.1.3}$$

Le tenseur des déformations élastiques s'écrit comme suit

$$\boldsymbol{E}^{e} = \frac{1}{2} \left\{ \boldsymbol{F}^{eT} \boldsymbol{F}^{e} - \boldsymbol{1} \right\} \tag{6.1.4}$$

Le second tenseur de Piola Kirchoff est lié au tenseur des contraintes de Cauchy par la relation suivante :

$$\boldsymbol{T} = \boldsymbol{F}^{e^{-1}} \left\{ \left(\det \boldsymbol{F}^{e} \right) \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{F}^{e^{-T}} \right\} \tag{6.1.5}$$

Nous présentons ici le modèle de Cheong et al. (Cheong et al. 2004), décrivant l'effet du glissement des dislocations sur chaque système de glissement. La loi d'écoulement est celle proposée par Busso (Busso 1990). La contrainte perçue par une ligne de dislocation dépend de la scission résolue sur le plan de glissement considéré et de la contrainte due à la présence de dislocations et s'écrit comme suit:

$$\tau_{l}^{\alpha} = \left| \tau^{\alpha} \right| - S^{\alpha} \frac{\mu}{\mu_{0}} \tag{6.1.6}$$

Ici τ_{l}^{α} est la contrainte d'écoulement, τ^{α} est la scission sur le plan de glissement, S^{α} est la résistance athermique au glissement d'une dislocation qui sera explicitée par la suite. μ et μ_{0} représentent respectivement le module de cisaillement à la température étudié et le module de cisaillement à zéro Kelvin.

Dans cette approche raffinée on différencie les dislocations statistiquement présentes des dislocations géométriquement nécessaires afin de prendre en compte l'effet du gradient de déformation engendré par la présence de ces dernières. Comme dans le cas des approches de Kocks et Mecking,

l'écrouissage dépend directement de l'évolution de la densité de dislocations. Dans l'approche présente, il est nécessaire de définir deux lois d'évolution pour chaque type de dislocations. Considérons tout d'abord le cas des dislocations géométriquement nécessaires, introduites par Nye (Nye 1953), dont l'évolution est donnée par les travaux de Busso et al. (Busso et al. 2000). La densité de dislocations géométriquement nécessaire, notée ρ_G^α, peut être décomposée en la somme des dislocations vis et des composantes normales $\rho_{G_{en}}^\alpha$ et tangentielles $\rho_{G_{et}}^\alpha$ des dislocations coin :

$$\boldsymbol{\rho}_G^\alpha = \rho_{G_s}^\alpha \boldsymbol{m}^\alpha + \rho_{G_{et}}^\alpha \boldsymbol{t}^\alpha + \rho_{G_{en}}^\alpha \boldsymbol{n}^\alpha \tag{6.1.7}$$

Les contraintes de résistance au glissement sont donnée par relation de type Taylor écrite comme suit :

- Dans le cas des dislocations statistiquement présentes:

$$S_S^\alpha = \lambda_S \mu_0 b_S^\alpha \sqrt{\sum_{\beta=1}^{N} h_S^{\alpha\beta} \rho_S^\beta} \tag{6.1.8}$$

- Dans le cas des dislocations géométriquement nécessaires:

$$S_G^\alpha = \lambda_G \mu_0 b_G^\alpha \sqrt{\sum_{\beta=1}^{N} h_G^{\alpha\beta} \rho_G^\beta} \tag{6.1.9}$$

Dans les relations (6.1.8) et (6.1.9) les coefficients λ_i et $h_i^{\alpha\beta}$, $i = S, G$ représentent respectivement des paramètres statistiques décrivant l'arrangement spatial des dislocations et des fonctions d'interactions entre les différentes composantes des dislocations. La contrainte de résistance au glissement est la moyenne des contributions des deux types de dislocations et s'écrit comme suit:

$$S^\alpha = \left[\left(S_S^\alpha \right)^2 + \left(S_G^\alpha \right)^2 \right]^{1/2} \tag{6.1.10}$$

Le taux de déformation sur le système de glissement α résulte du mécanisme thermiquement activé de glissement de dislocation qu'on choisis ici de décrire avec une expression exponentielle :

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \exp\left\{ \frac{-F_0}{kT} \left\langle 1 - \left\langle \frac{\left|\tau^{\alpha}\right| - S^{\alpha}\,\mu/\mu_0}{\hat{\tau}_0\,\mu/\mu_0} \right\rangle^{p} \right\rangle^{q} \right\} \mathrm{sgn}(\tau^{\alpha}) \qquad (6.1.11)$$

Où $\dot{\gamma}_0$ est le taux de déformation moyen engendré par un unique évènement de glissement, F_0 est l'énergie libre de Helmholtz, k est la constante de Boltzmann, T est la température, $\hat{\tau}_0$ est la contrainte maximale de glissement sans apport d'énergie au système par fluctuation thermiques, et p et q décrivent la « forme » du diagramme de résistance au mouvement des dislocations.

L'évolution de la densité de dislocations géométriquement nécessaire est obtenue en écrivant la discontinuité du circuit de Burger à partir du gradient de déformation plastique et à partir de la définition du tenseur de dislocations de Nye. La relation obtenue est par la suite différenciée par rapport au temps afin d'obtenir l'évolution de dislocations géométriquement nécessaire suivante :

$$b_G^{\alpha}\left(\dot{\rho}_{G_s}^{\alpha}\boldsymbol{m}^{\alpha} + \dot{\rho}_{G_{et}}^{\alpha}\boldsymbol{t}^{\alpha} + \dot{\rho}_{G_{en}}^{\alpha}\boldsymbol{n}^{\alpha}\right) = \boldsymbol{curl}\left\{\dot{\gamma}^{\alpha} n^{\alpha} \boldsymbol{F}^{p}\right\} \qquad (6.1.12)$$

L'évolution de la densité de dislocations statistiquement présentes est basée sur les effets antagonistes de stockage et d'annihilation de dislocations (Cheong et al. 2004). Ici encore on différencie les composantes vis des composantes coins. Dans les deux cas le stockage de dislocations est décrit d'une manière statistique en tenant compte du libre parcours moyen des dislocations qui est lié à la densité de dislocations stockées par l'application du principe de similitude. L'annihilation de dislocations est décrite par l'introduction d'une surface d'annihilation dépendant du caractère de la dislocation considérée. Si une dislocation de même caractère pénètre cette surface on considère qu'elle sera alors annihilée. En appliquant la relation d'Orowan on obtient le taux d'annihilation. Enfin, l'évolution de la densité de dislocations statistiquement présentes s'écrit comme la somme du taux de stockage et du taux d'annihilation, on obtient:

- Dans le cas des dislocations coins (l'indice e réfère aux composantes coins)

$$\dot{\rho}_{Se}^{\alpha} = \frac{C_e}{b^{\alpha}}\left[K_e\sqrt{\sum_{\beta=1}^{N}\rho_T^{\beta}} - 2d_e\rho_{Se}^{\alpha}\right]\left|\dot{\gamma}^{\alpha}\right| \qquad (6.1.13)$$

- Dans le cas des dislocations vis (l'indice sw réfère aux composantes vis)

$$\dot{\rho}_{Ssw}^{\alpha} = \frac{C_{sw}}{b^{\alpha}}\left[K_{sw}\sqrt{\sum_{\beta=1}^{N}\rho_T^{\beta}} - \rho_{S_{sw}}^{\alpha}\left\{ K_{sw}\pi d_{Sw}^2\sqrt{\sum_{\beta=1}^{N}\rho_T^{\beta}} + 2d_{Sw}\right\}\right]\left|\dot{\gamma}^{\alpha}\right| \qquad (6.1.14)$$

Dans les relations (6.1.13) et (6.1.14), $\dot{\rho}_{Se}^{\alpha}$ et $\dot{\rho}_{Ssw}^{\alpha}$ sont les taux d'évolution des densités de dislocation coins et vis sur le système de glissement considéré. Les paramètres $C_i, d_i, K_i \;\; i = e, sw$ représentent respectivement un paramètre décrivant la magnitude du taux de glissement, la distance critique d'annihilation et un coefficient de proportionnalité décrivant la mobilité des dislocations. b^{α} est la norme du vecteur de Burger.

Le modèle de Cheong et al. permet de décrire avec succès l'effet de taille dans le comportement des polycristaux ayant des tailles de grains variant de 150 microns à 7.5 microns. Les simulations sont réalisées sur de cubes contenant 8 grains cubiques de même dimensions. La densité initiale de dislocations géométriquement nécessaires est nulle dans toutes les simulations. Les auteurs remarquent un manque de convergence du modèle lorsque les tailles de grains sont inférieures à 30 microns qui est expliqué par le fait que la densité initiale de dislocations statistiquement présentes est faible par rapport à la très rapide évolution de la densité de dislocations géométriquement nécessaires.

B. Extension au cas de l'émission/pénétration

Dans cette section nous proposons un formalisme dont le développement est en cours permettant de prendre en compte séparément l'effet du mécanisme d'émission de dislocations par les ledges et l'effet de la pénétration des dislocations émises dans les joints de grains. Rappelons encore ici que cette approche est plus précise que l'approche proposée au chapitre précédent dans la mesure où l'on pourra, a terme, considérer simultanément tous les angles d'inclinaison des joints de grains possible.

Tout d'abord, le modèle de présenté au chapitre précédent démontre que l'émission de dislocations par les joints de grains, et plus précisément par les ledges peut être responsable de la chute de la loi de Hall et Petch. En effet dans le domaine nanocristallins, la densité de dislocations dans les cœurs de grains est moindre et les champs de déformation locaux dans les joints de grains sont plus à même à rendre plus « souple » les joints de grains ce qui à pour conséquence de favoriser l'émission de dislocations par les joints de grains. A l'aide de simulations de dynamique moléculaire on a pu montré que le mécanisme d'émission est thermiquement activé et que les dislocations émises se déplacent sur les mêmes systèmes de glissement que les dislocations présentes dans les cœurs de grains. La problématique se résume donc à modéliser avec les outils de la plasticité cristalline le mécanisme d'émission de dislocations ainsi que le

mécanisme de pénétration des dislocations émises dans les joints de grains. Si dans l'approche de Cheong et al. il n'apparaît pas nécessaire de représenter avec précision les joints de grains, dans l'approche présente, il est indispensable de décrire le plus précisément possible les joints de grains. Les travaux de Nye nous indiquent que les joints de grains peuvent être considéré comme des zones à très forte concentration de dislocations géométriquement nécessaire dont la présence est requise pour assurer que les deux cristaux formant l'interface ont un angle d'inclinaison non nul.

Tout d'abord, présentons une modélisation numérique possible (voir Figure VI-1). On observe 6 grains, de couleur bleu clair, enrobés de joints de grains (bleu foncé). Le comportement des cœurs de grains est ici encore différent de celui des joints de grains pour lesquels une nouvelle loi de comportement doit être développée.

Dans le cas des cœurs de grains, le formalisme développé par Busso et Cheong et al. peut être utilisé dans sa totalité. Ainsi le comportement des cristaux est décrit par les équations (6.1.1) à (6.1.14). Notre modèle décrira donc les mécanismes de stockage et d'annihilation des dislocations sur chaque système de glissement et .les contributions des dislocations statistiquement présentes et géométriquement nécessaires seront donc différenciées.

Deux issues majeures doivent être soulevées: la description des joints de grain, qui doivent avoir un caractère changeant avec l'angle d'inclinaison des grains le formant, et la description de l'émission/pénétration des dislocations.

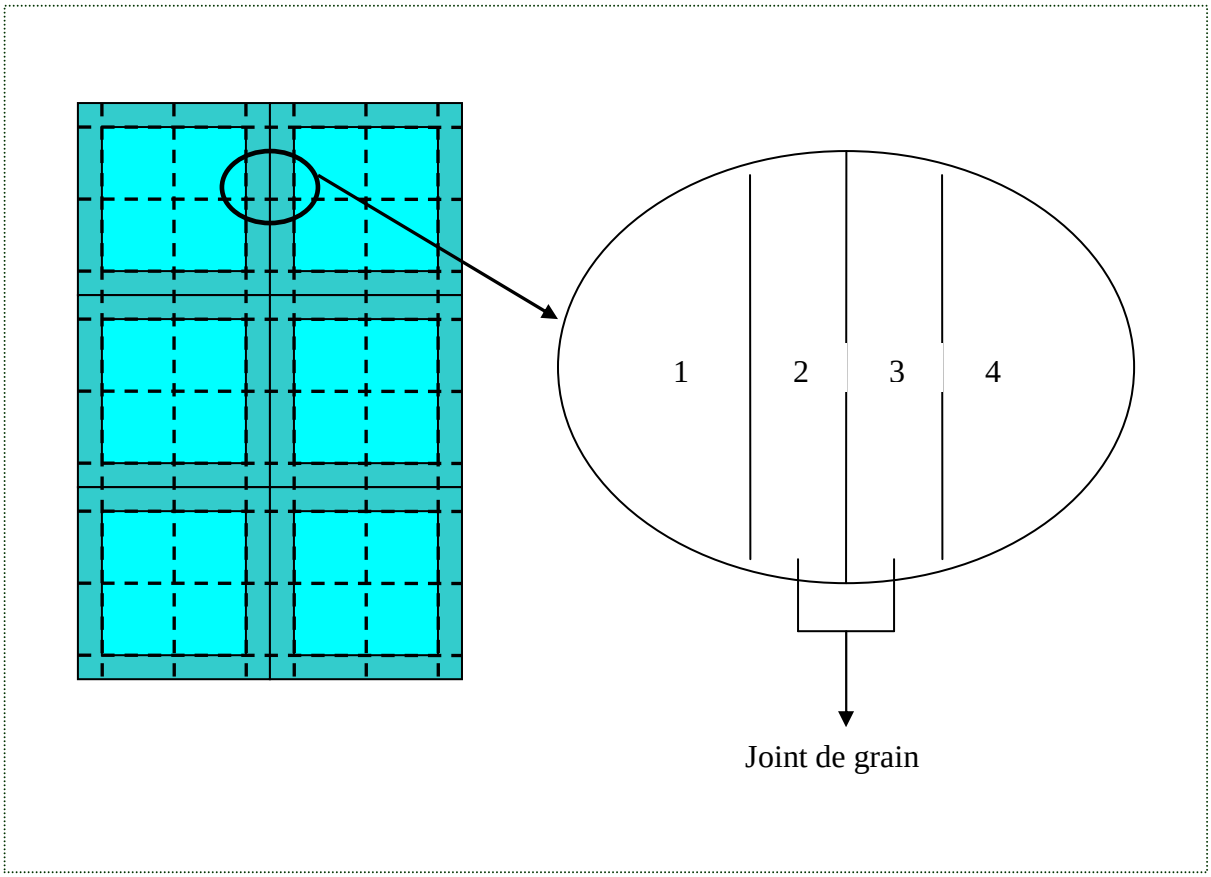


Figure VI-1: Modélisation par éléments finis

Deux approches peuvent être utilisées afin de décrire la géométrie des joints de grains. Comme rappelé dans l'état de l'art, les joints de grains peuvent être représenté à l'aide d'enchaînements d'unités structurelles de désinclinaisons. Cependant il n'existe pas encore de lois de comportement permettant de décrire le comportement des désinclinaison. La seconde approche, que l'on utilisera dans ce travail, consiste à représenter les joints de grains comme des zones à très forte concentration de dislocations géométriquement nécessaires. Dans ce cas, le joint de grain pourrait être représenté par les zones 2 et 3 de la Figure VI-1, où l'orientation cristallographique de la zone 2 est la même que celle du grain 1. De même la zone 3 à la même orientation cristallographique que le grain 4.

La description des joints de grain basée sur les dislocations géométriquement nécessaire requiert l'évaluation de la densité initiale de dislocations présentes initialement présentes dans le matériau. On pourrait alors se baser sur des techniques expérimentales où sur les modèles existant. Dans le cas des petits angles d'inclinaisons, on peut déduire la densité de dislocations à partir de la formule de Frank. Cependant, tous les procédés de fabrication mènent à des polycristaux constitués majoritairement de joints de grain à grand angle d'inclinaison.

La seconde étape consiste à modéliser le comportement des joints de grain. Avec le choix de la représentation des joints de grains basée sur une densité de dislocations géométriquement nécessaires. Le formalisme développé par Busso et al. peut être modifié afin de décrire le comportement des joints de grains.

Dans un premier temps, nous choisissons d'ignorer les mécanismes d'émission de dislocations par les « ledges » et de pénétration de dislocations dans les joints de grains. Cette première approche permettra de prédire la loi de Hall et Petch jusqu'au début du régime NC (d~80 nm). Ainsi, le comportement en plasticité des joints de grain pourrait être décrit de la manière suivante. Les équations (6.1.1) à (6.1.7) peuvent etre réutilisées sans aucune modification afin de décrire le gradient de déformation, le tenseur des contraintes de Cauchy et la décomposition de la densité de dislocations géométriquement nécessaire.

La déformation des joints de grains peut être décrite à l'aide du mécanisme de glissement des dislocations. Ainsi, le taux de déformation viscoplastique sur chaque système de glissement des joints de grains peut être décrit par(6.1.11). La contrainte de résistance au glissement sur chaque système de glissement dépend uniquement de la contribution des dislocations géométriquement nécessaire et s'écrit donc :

$$S^{\alpha} = S_G^{\alpha} \tag{6.1.15}$$

Où $S_G^{\alpha} = \lambda_G \mu_0 b_G^{\alpha} \sqrt{\sum_{\beta=1}^{N} h_G^{\alpha\beta} \rho_G^{\beta}}$.

Rappelons ici que la densité initiale de dislocations géométriquement nécessaires dans les joints de grain est grande ce qui engendre directement que la contrainte de résistance au glissement soit grande elle aussi. Ainsi, on s'attend donc à pouvoir prédire la loi de Hall et Petch à l'aide de cette première approche. De plus cette approche devrait permettre de s'affranchir du problème de convergence rencontré par Cheong et al. dans le cas de petite taille de grains.

La seconde étape du développement du formalisme consiste à modéliser les mécanismes d'émission et de pénétration des dislocations. Cette étape permettra de prédire la chute de la loi de Hall et Petch et d'évaluer les contributions respective des mécanismes d'émission et de pénétration de dislocation dans les joints de grains. Bien que le formalisme n'ait pas encore été développé, notre approche devrait être basée sur le principe suivant. Un évènement d'émission d'un dislocation par un joint de grain engendrera deux effets : la disparition d'une dislocation dans un joint de grain et, l'apparition d'une nouvelle dislocation dans le cœur de grain. Le mécanisme de pénétration des dislocations présentes dans les cœurs de grain sera considéré comme l'évènement inverse. Numériquement ce transfert de dislocations pourrait être modélisée

à l'aide de l'introduction d'une nouvelle condition aux limites sur les flux de dislocation au niveau des points d'intégration des éléments. Une approche similaire, basée sur les flux de densité de dislocations a déjà été réalisée avec succès par Arsenlis et al. (Arsenlis et al., 2004)

Dans la suite de ce travail de thèse nous développerons des critères d'émission et de pénétration de dislocations. L'objectif serait évidemment de pouvoir lier les résultats obtenus par simulations de DM à ces critères d'activations des mécanismes d'adoucissement. La figure 6-2 présente les étapes du développement du modèle. Ainsi, comme précisé ci dessus la loi de Hall et Petch sera prédite jusqu'à des tailles de grains de ~50nm. Dans un premier temps nous utiliserons une approche locale qui sera suivit d'une approche non locale qui permettra de quantifier les effets à distance des gradients de déformation. Enfin, par la suite nous introduirons une modélisation des phénomènes d'émission et de pénétration de dislocations

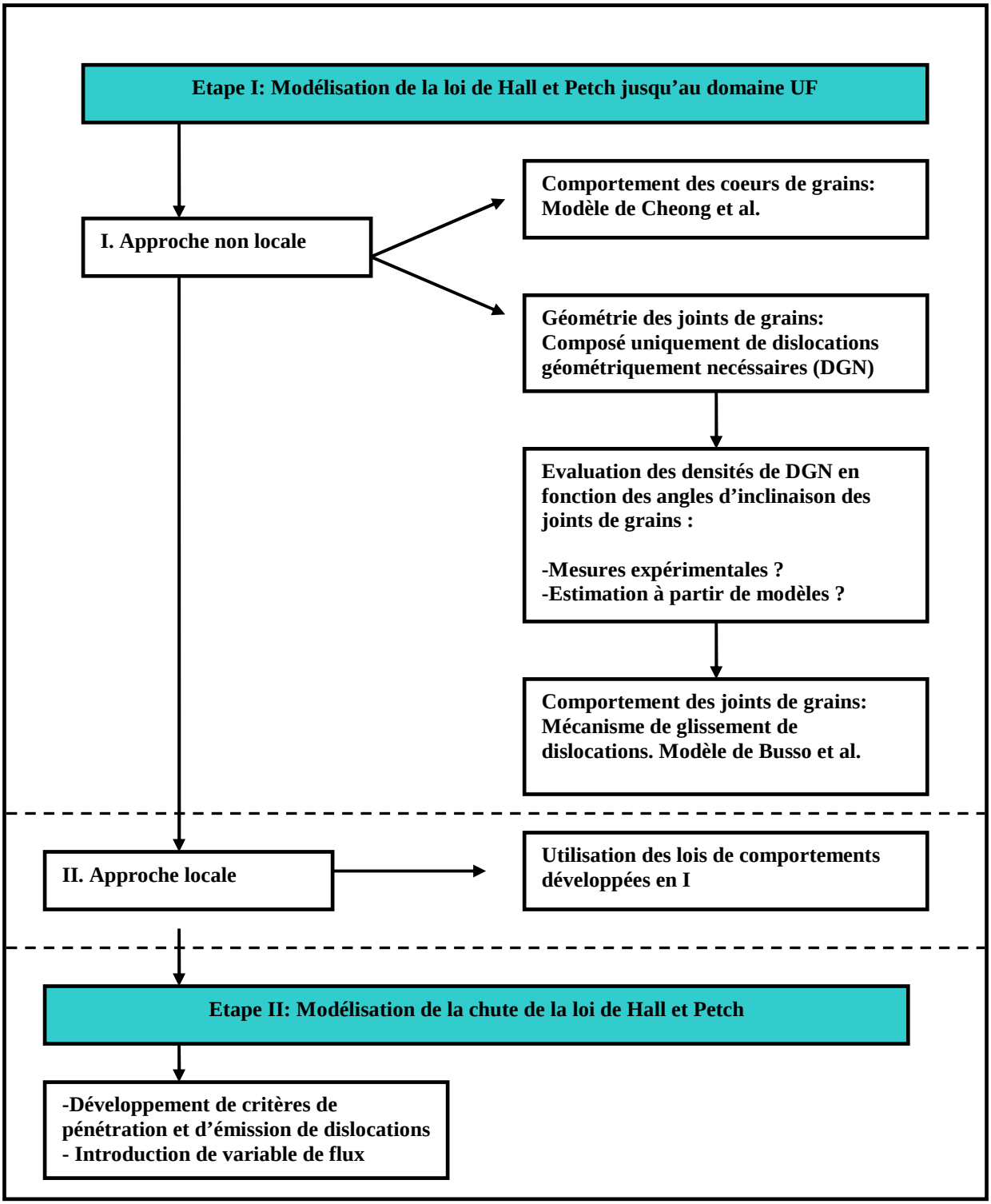


Figure 0-2: Etapes du développement du modèle

Références partielles :

Arsenlis, A. ,Parks, D.M. et al. (2004), “ On the evolution of crystallographic dislocation density in non-homogeneously deforming crystals”, Journal of the mechanics and physics of solids **52**, 1213-1246

Asaro, R. J. and J. R. Rice (1977). "Strain localization in ductile single crystals." Journal of the mechanics and physics of solids **25**: 309-338.

Busso, E. P. (1990). "Cyclic deformation of monocrystalline nickel aluminide in high temperature coatings." PhD thesis.

Busso, E. P., F. T. Meissonier, et al. (2000). "Gradient-dependent deformation of two-phase singel crystals." Journal of the mechanics and physics of solids **48**: 2333-2361.

Cheong, K. S. and E. P. Busso (2004). "Discrete dislocation density modelling of single phase FCC polycrystals aggregates." Acta materialia **52**: 5665-5675.

Cheong, K. S. and E. P. Busso (2004). "A study of microstructural length scale effects on the behaviour of FCC polycrystals using strain gradient concepts." International journal of plasticity **XX**: XXXX.

Clayton, J. D. and D. L. McDowell (2003). "Finite polycrystalline elastoplasticity and damage: multiscale kinematics." International journal of solids and structures.

Meissonier, F. T., E. P. Busso, et al. (2001). "finite element implementation of a generalised non-local rate-dependent crystallographic formulation for finite strains." International journal of plasticity **17**: 601-640.

Nemat-Nasser, S. (1979). "Decomposition of strain measures and their rates in finite deformation elastoplasticity." Mechanics of materials **31**: 493-523.

Nye, J. F. (1953). "Some geometric relations in dislocated crystals." Acta metallurgica **1**: 153-162.

Conclusions et perspectives

Les travaux de recherches présentés dans ce document avaient pour objectif principal d'identifier les mécanismes de déformations viscoplastiques opérationnels dans les matériaux nanocristallins et d'en proposer une modélisation basée sur des raisonnements physiques et sur l'analyse critique des travaux disponibles dans la littérature. A long terme, ce travail s'inscrit dans un projet d'optimisation des procédés de fabrication afin de rendre possible l'utilisation des nanomatériaux dans un cadre industriel. Comme précisé tout au long de ce document, les connaissances acquises dans le domaine des matériaux nanocristallins sont pour la plupart sujettes à discussion. Aussi, il nous a paru nécessaire d'investiguer rigoureusement les effets des mécanismes les plus souvent suspectés d'être responsable du comportement anormal des matériaux nanocristallins.

Ainsi, nous avons consacré notre première approche à l'étude des effets des mécanismes de diffusion sur le comportement macroscopique des matériaux NC. En considérant la différence microstructurales des grains et des joints des grains et l'évolution de la fraction volumique des joints de grain avec la taille de grain, nous avons adopté une topologie composite biphasé afin de représenter le matériau. Le matériau équivalent est donc composé d'une phase inclusionnaire représentant les cœurs de grains et d'un phase matrice représentant les joins de grains. Les mécanismes de glissements de dislocation et de fluage de Coble sont supposés actifs dans les cœurs de grains alors que le comportement de la phase matrice est supposée avoir un comportement élastique plastique parfait. Ce choix était alors motivé par le peu de connaissances disponibles sur le comportement des joints de grains. La transition d'échelle est réalisée à l'aide d'un schéma autocohérant.

Le modèle révèle que la chute de la loi de Hall et Petch, qui se traduit par un comportement plus souple des matériaux NC ayant des tailles de grains inférieures à la taille de grain critique (d~25 nm), pourrait être attribuée à l'activité des mécanismes de diffusion. En effet on remarque que la chute de la loi de Hall et Petch se produit lorsque le mécanisme de fluage de Coble domine le mécanisme de glissement des dislocations.

Dans un second temps, le modèle est étendu au cas du glissement des joints de grain accommodé par la diffusion de lacune le long des joints de grains, connu sous le nom de glissement de Lifschitz. Cette extension mène à des chutes de la loi de Hall et Petch beaucoup plus prononcées que celles mesurées expérimentalement. Ainsi, étant donné qu'aucune expérimentale n'a démontré l'activité du mécanisme de glissements des joints de grains dans le cas de matériaux ayant des tailles de grains de ~25nm, nous en avons conclus que le mécanisme de glissement de Lifschitz n'est pas actif dans les matériaux NC.

Motivés d'une part par de récents résultats expérimentaux tendant à démontrer que les taux de déformation en fluage mesurés jusqu'alors seraient dus à l'endommagement du matériau, et d'autre part par des simulations de dynamique moléculaire suggérant qu'un mécanisme d'émission de dislocations par les joints de grains puisse être opérationnel dans le régime nanocristalline, nous avons été amené à proposer une nouvelle modélisation tenant compte de ce mécanisme.

Par le biais d'une réflexion de fond visant à justifier l'activité des sources de dislocations intergranulaires, ainsi qu'à identifier la nature de ses sources (désinclinaisons, « ledge »), nous avons développé un modèle permettant de décrire l'effet du mécanisme combiné d'émission de dislocation et de pénétration de dislocation sur le comportement des joints de grains. Cette nouvelle loi de comportement s'appui sur le formalisme d'écriture des mécanismes thermiquement activés et les paramètres nécessaires sont évalués à partir de raisonnement simples basés sur des modèles théoriques et simulations de dynamique moléculaire disponibles dans la littérature. Dans le modèle proposé, nous supposons que le comportement des joints de grains devient plus souple lorsque la taille de grain est diminuée en raison de l'augmentation de la présence de sources de dislocations qui mène à une pénétration des dislocations émises dans les joints de grains. La pénétration des dislocations est modélisée comme un choc mou menant à une diffusion de masse localisée dans les zones de pénétrations des dislocations. La topologie utilisée dans le premier modèle est reprise et la transition d'échelle est réalisée à l'aide d'un schéma sécant autocohérant. Enfin, à partir des prédictions du comportement des cœurs de grains provenant de la première approche, nous avons identifié les limitations de l'écriture du mécanisme d'écrouissage utilisée jusqu'alors. Suite à cela, nous avons proposé une extension des modèles d'écrouissage des métaux dans le cas de matériaux UF et NC. Entre autre, nous proposons l'introduction d'un nouveau terme de résistance au glissement des dislocations représentant l'effet à distance exercé sur les dislocations par les joints de grains.

Les simulations du modèle mènent à des prédictions très proches des résultats expérimentaux obtenues sur des échantillons de grande qualité. Nous démontrons, que le comportement dit « anormal » des matériaux nanocristallins pourrait aussi être du au changement de caractère relatif des joints de grain lorsque la taille de grain est faible. En d'autre termes, en diminuant la taille de grain, le comportement des joints devient plus souple que celui des cœurs de grains ce qui mène à la chute de la loi de Hall et Petch. De plus, nous avons simulé le comportement en fluage du matériau et nos prédictions des taux de déformation sont en accord avec les derniers résultats expérimentaux en date.

Dans l'objectif de mieux comprendre l'effet des « ledges » sur le mécanisme d'émission de dislocation par les joints de grains, nous avons eut recours à des simulations de dynamique moléculaire. Dans ces dernières nous avons simulé le comportement d'une interface parfaite et le comportement d'une interface contenant un « ledge ». Les simulations nous ont permis d'évaluer avec plus de précision les paramètres décrivant le mécanisme d'émission de dislocations. De plus, nous avons pu identifier les sources

principales de dislocations en fonction des sollicitations imposées. Enfin, les simulations de dynamique moléculaire montrent que les « ledges » ne sont pas de simples donneurs de dislocations mais de véritables sources de dislocation au même titre qu'une source de Frank et Read.

Les lois de comportements développés sont introduite dans un code de calcul par élément fini afin d'investiguer l'effet de l'orientation des joints de grains par rapport aux surfaces de traction. Les résultats obtenus nous permettent de conclure que l'orientation des joints de grains pourrait avoir une forte influence sur la réponse des matériaux NC. De plus, de très fortes concentrations de contrainte localisées au niveau des lignes triples sont révélées par nos simulations.

Enfin, afin de s'affranchir des limitations du modèle tenant compte du mécanisme d'émission de dislocation par les « ledges » et du mécanismes de pénétration de dislocations dans les joints de grains, nous présentons le formalisme d'une nouvelle modélisation, qui sera réalisée par éléments finis, basée sur la plasticité cristalline. A terme ce modèle permettra d'évaluer séparément les effets des mécanismes d'émission et de pénétration de dislocations. De plus, grâce à cette approche, nous serons en mesure d'évaluer avec beaucoup de précision le comportement d'un matériau comportant plusieurs types de joints de grains. Ceci permettra de quantifier d'une part l'effet de l'orientation relative des joints de grains par rapport aux surfaces limites et d'autre part l'effet de la texture du matériau.

Suite à cette première étude du comportement des matériaux nanocristallins, nous sommes désormais en mesure d'établir une nouvelle carte des mécanismes de déformations (Voir Figure -1). Ainsi, lorsque les tailles de grains sont inférieures à ~50 nm, l'activité des dislocations au sein des cœurs de grains au bénéfice des mécanismes d'émission de dislocations par les joints de grains et de pénétration de dislocations dans les joints de grains. Lorsque la taille de grain est inférieure à~10 nm, sachant que les mécanismes de diffusion ne sont probablement pas opérationnels et que l'activité des dislocations est nulle, nous suggérons que la déformation plastique du matériau résulte du glissement des joints de grain non accommodé par la diffusion de lacune. Les tailles de grains limites dépendent évidemment du taux de déformation imposé mais aussi du procédé de fabrication.

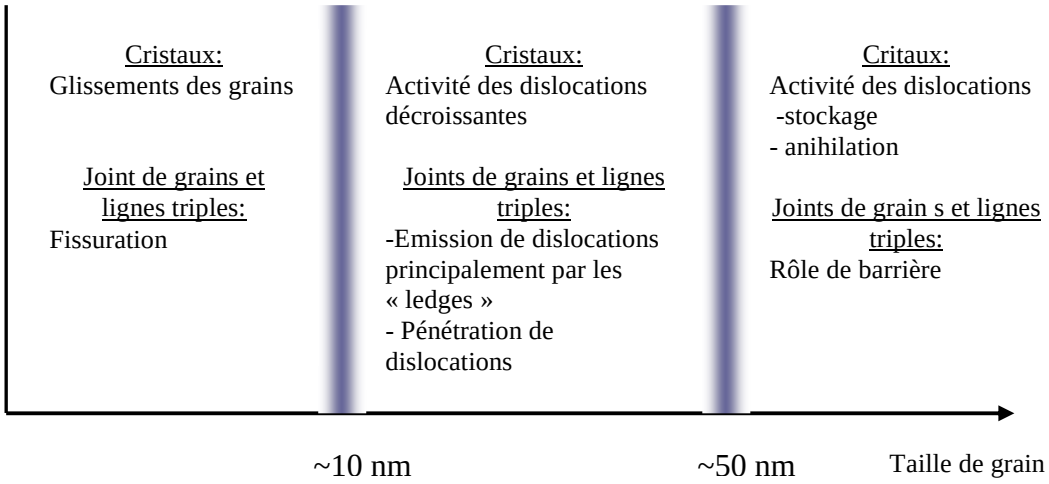


Figure -1: Carte des mécanismes de déformation

Etant donné la quantité de questions nécessitent de plus amples travaux, les perspectives de recherches à venir sont nombreuses. A cours termes, nous continuerons l'implémentation et le développement du formalisme basé sur la plasticité cristalline. Cette approche nous apparaît capitale car de nos nombreux enseignements pourront être tiré des résultats obtenus. Dans un second temps nous continuerons les travaux de dynamique moléculaire afin de quantifier l'influence de la géométrie des joints de grains sur le mécanisme d'émission de dislocations. Les résultats de cette étude pourraient être couplé à l'approche par éléments finis en cours de développement. Enfin, étant donné que les mécanismes de diffusions n'apportent probablement pas une contribution majeure à la déformation des matériaux NC et que l'activité des dislocations devient nulle lorsque l'on atteint des tailles de grains inférieures à ~10 nm, il nous semble intéressant de développer un modèle permettant de décrire l'effet du mécanisme de glissement des joints de grains non accommodé par la diffusion de lacune. Ce modèle permettra donc de décrire l'endommagement du matériau.

Enfin, à longue échéance, il sera nécessaire de lier les modèles développés dans ce travail de thèse et dans les travaux à venir aux procédés de fabrication utilisés. Ainsi, nous serons en mesure d'une part de sélectionner le procédé de fabrication en fonction du cahier des charges du matériau désiré et d'autre part d'optimiser les procédés de fabrication afin de fabriquer de nouveau matériaux.

Annexe: La transition d'échelle

Dans cette annexe nous rappelons brièvement les techniques de transitions d'échelles utilisées dans ce travail de thèse.

Introduction

Une des difficultés majeures de ce travail de thèse réside dans la transition d'échelle. En effet, la seule connaissance des mécanismes de déformation à l'échelle microscopique ne suffit pas pour prédire le comportement du matériau. A l'aide de schémas d'homogénéisations adaptés on obtient des relations entre les comportements locaux des constituants et le comportement macroscopique du matériau.

De nombreux schémas micromécaniques ont été développés ces dernières décennies, et dans le cadre de ce rappel de micromécanique, l'objectif n'est évidement pas de répertorier et de relater de tous les schémas existants mais de présenter uniquement les schémas utilisés dans ce travail de thèse ainsi que leur dérivation. Ainsi, l'extension de la solution d'Eshelby dans le cas viscoplastique proposé par Cherkaoui et al. ainsi que le schéma sécant autocohérant développé par Berbenni et al seront présentés dans ce chapitre (Cherkaoui et al. 2000; Berbenni et al. 2004). Présentons tout d'abord un bref état de l'art.

La méthodologie générale du changement d'échelle est présentée dans la Figure 01. Typiquement les schémas micromécaniques sont composés de trois étapes, la première correspondant à la définition d'un volume élémentaire représentatif (ci-après VER) sur lequel la technique de transition d'échelle sera opérée. Ce dernier fut introduit dans les travaux de Hashin et Hill (Hashin et al. 1963; Hill 1965), et doit répondre à trois conditions; il doit être suffisamment petit de sorte à représenter la microstructure du matériau et suffisamment grand pour pouvoir décrire le comportement global du matériau. De plus, ce dernier doit être représentatif du matériau dans le sens où ces propriétés doivent être indépendantes de son lieu d'extraction. La seconde étape consiste à déduire les champs locaux associés aux champs macroscopiques imposés. Si l'on impose des contraintes aux limites, l'étape est dite étape de concentration, si des déplacements sont imposés aux limites la seconde étape est dite étape de localisation. Le dernière étape, dite d'homogénéisation, correspond à l'application des lois de comportement locales suivie d'une procédure de moyenne appropriée (Bornert 1996; Berbenni et al. 2004).

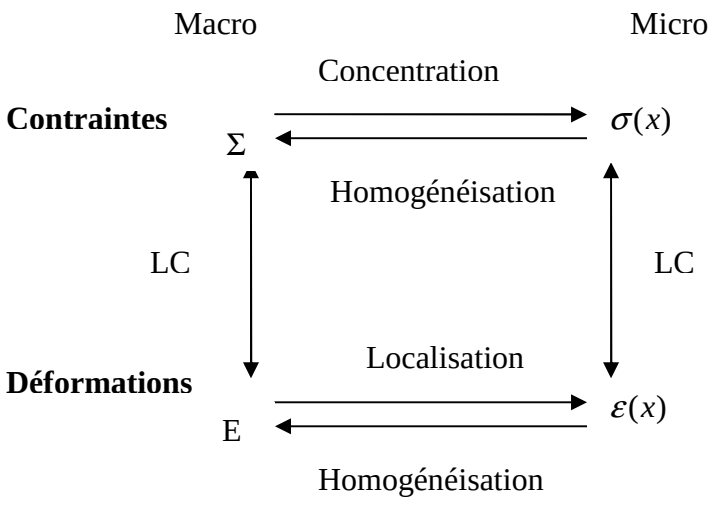


Figure 01: Schéma du fonctionnement du changement d'échelles

La contribution d'Eshelby, qui fut l'un des pionniers dans le domaine de la micromécanique notamment grâce a sa solution du problème de l'inclusion, est un travail de référence, dans le sens où une très grande partie des travaux de micromécanique se basent encore aujourd'hui sur cette contribution (Eshelby 1957). Dans le problème de l'inclusion, une inclusion ellipsoïdale est plongée dans une matrice élastique infinie, le matériau est homogène et l'inclusion subit une «eigenstrain» qui correspond à une déformation sans contraintes pouvant provenir par exemple d'un changement de phases où encore d'un changement de la température de l'inclusion. Eshelby établit alors une relation entre le champ de déformation local et l'eigenstrain par l'introduction d'un tenseur dit d'Eshelby. Une description plus approfondie de la méthodologie suivie sera présentée dans la section suivante. On y abordera entres autres points la solution des équations de Navier par transformée de Fourier et par les fonctions de Green (Mura 1993).

Nous serons amenés à traiter de comportements elasto-viscoplastiques, qui ne peuvent être traités de manière exacte par la micromécanique. Aussi, des approximations menant à des prédictions plus ou moins «dures» du comportement des agrégats polycristallins seront faites. Deux «écoles» ont proposé le traitement des comportements élastoplastiques (Molinari et al. 1997). La première propose une approche incrémentale alors que la seconde se base sur des fluctuations de champs. En 1961 et 1962, Kroner, Budiansky, et Wu (ci-après KBW) proposent une approche basées sur les fluctuation locales de champ de déformation plastique autour du taux de déformation du milieu homogène équivalent, ce dernier étant indépendant des coordonnées d'espaces (Kroner 1961; Budiansky et al. 1962). Typiquement, les schémas micromécaniques basés sur ce type d'approche ont une tendance à surestimer l'écrouissage des matériaux. L'approche de KBW traduit la différence entre les champs de déformation globaux et locaux à l'aide d'un terme élastique qui mène inévitablement à cette limitation.

En 1965 Hill proposa une approche incrémentale où les taux de déformations sont reliés aux taux de contraintes par un tenseur élasto-plastique. On peut se représenter le schéma de Hill d'une manière simple

comme correspondant à une linéarisation de la loi de comportement suivie de l'application de la solution d'Eshelby (Hill 1965). Les schémas de type Hill mènent typiquement à des prédictions moins dures que celles obtenues par les schémas basés sur l'approche de Kroner.

Cependant ces types d'approches sont toutes deux basées sur des approximations et sont encore sujettes à discussion. Dans les approches basées sur les fluctuations de champs, l'utilisation de la solution d'Eshelby n'est pas tout à fait légitime car les champs de déformation plastique ne sont pas «per se» des eigenstrains. Les approches incrémentales nécessitent une linéarisation de la loi de comportement ce qui peut s'avérer délicat et peut nuire à la précision des résultats.

De nombreuses extensions des modèles de KBW et de Hill ont été proposées durant les dernières décennies. Dans le cas des comportements élasto-viscoplastique, l'approche de Kroner a souvent été préférée à celle de Hill pour une raison majeure liée à la difficulté de la linéarisation des lois de comportements élasto-viscoplastiques. En 1981, Weng propose une extension du model de Kroner dans le but de décrire le comportement en fluage des matériaux (Weng 1981). L'auteur défend la validité de l'utilisation de la solution d'Eshelby par le fait que les déformations en fluage sont indépendantes du taux de contrainte et peuvent donc être assimilées à des eigenstrains. En 2000 Cherkaoui et al. ont développé un schéma auto cohérent, basé sur l'approche de Kroner, tenant compte des fluctuations des taux de déformations viscoplastiques et des modules d'élasticité. Ce schéma permet d'obtenir des prédictions moins dures du comportement viscoplastique (Cherkaoui et al. 2000). Plus récemment, Berbenni et al. ont introduit un nouveau schéma sécant, dont le développement sera explicité dans la suite de cette annexe, menant lui aussi à des prédictions plus souples du comportement (Berbenni et al. 2004). Le succès des approches de type Kroner a fait l'objet d'une discussion approfondie dans les travaux de Masson et Zaoui qui ont introduit un model auto cohérent que l'on pourrait rapprocher des schéma de type Hill (Masson et al. 1999). Dans ce schéma, le problème élasto-viscoplastique est transformé en un problème linéaire thermo-viscoélastique équivalent. L'implémentation de ce modèle est nettement plus complexe que celle des schémas de type Kroner, cependant le schéma de Masson et Zaoui semble être très performant.

Equations de Navier

Nous traiterons ici le problème d'un VER linéaire homogène contenant une seule inclusion sujette à une eigenstrain et plongée dans une matrice de dimensions infinies (voir Figure 0-2). On réfère à ce problème comme le problème de l'inclusion. Les tenseurs d'élasticité des constituants seront notés C et l'on notera ε^* l'eigenstrain. Rappelons encore qu'une eigenstrain ne créerai pas de contrainte si l'inclusion n'était pas plongée dans la phase matrice.

Dans la suite de ce développement nous introduirons des relations permettant d'évaluer les eigenstrain dans l'inclusion et les contraintes engendrées par ces eigenstrains. Les indices i, j, k et l référeront aux composantes des tenseurs ainsi: $1 \le i, j, k, l \le 3$. Les tenseurs de quatrième ordre seront notés en caractères gras, les tenseurs de second ordre seront dénotés par des lettres grecques. Les produits doublement contractés seront notés «:». Ainsi on écrit de manière équivalente $\boldsymbol{C} : \varepsilon = \boldsymbol{C}_{ijkl}\varepsilon_{kl}$.

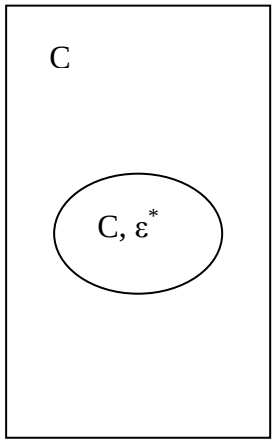


Figure 0-2: VER caractérisant le problème de l'inclusion

Localement dans l'inclusion, l'état de déformation totale, noté ε_{ij} , résulte de la déformation élastique, notée ε_{ij}^{e} et de l'eigenstrain ε_{ij}^{*} , on obtient ainsi:

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^{e} + \varepsilon_{ij}^{*} \qquad (1.1.1)$$

En appliquant la loi de Hooke et en tenant compte du fait que le champ de déformation doit être compatible, on obtient la relation suivante, qui n'est valable que dans le cas de milieu non polaire ou le tenseur d'élasticité est symétrique

$$\sigma_{ij} = \boldsymbol{C}_{ijkl}\left(u_{k,l} - \varepsilon_{kl}^{*}\right) \qquad (1.1.2)$$

Ici u_i est la composante dans la direction i du vecteur déplacement, et $u_{i,j}$ est sa dérivée par rapport à la coordonnée j. Enfin en introduisant les conditions d'équilibre, traduites par la nullité de la divergence du

tenseur des contraintes, les équations de Navier peuvent être introduites. Notons ici que dans un souci de simplicité, ce développement est limité au cas où aucune contrainte n'est appliquée au VER. On pourrait prendre en compte ces dernières en superposant la solution du problème homogène à la solution du problème "free body". On obtient ainsi:

$$\sigma_{ij} = \boldsymbol{C}_{ijkl} u_{k,lj} - \boldsymbol{C}_{ijkl} \varepsilon^*_{kl,j} \tag{1.1.3}$$

Le système d'équations définit par (1.1.3) est appelé équations de Navier. Ces dernières peuvent être résolues par transformer de Fourier où par les fonctions de Green.

Solution par transformée de Fourier

Voyons désormais comment les équations de Navier peuvent être résolues en réécrivant le champ d'eigenstrain à partir d'une transformée intégrale comme suit:

$$\varepsilon^*_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\varepsilon}^*_{ij}(\xi) \exp(i\xi \cdot x) d\xi \tag{1.1.4}$$

Les coefficients de Fourier étant donnés par :

$$\bar{\varepsilon}^*_{ij}(\xi) = (2\pi)^{-3} \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon_{ij}(x) \exp(-i\xi \cdot x) dx \tag{1.1.5}$$

On obtient les solutions des équations de Navier en écrivant le champ de déplacements à partir de sa transformée de Fourier et les coefficients sont obtenus grâce aux conditions de compatibilité et à l'introduction des expressions des champs de déplacement et de déformations dans (1.1.3). Bien que l'établissement des solutions des équations de Navier soit long, il ne présentent pas de difficultés majeures, le lecteur pourra se référer à Mura pour plus de détails (Mura 1993). On obtient donc après un peu d'algèbre les solutions suivantes :

$$u_i(x) = \frac{-1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{C}_{jlmn} \varepsilon^*_{mn}(x') \xi_l N_{ij}(\xi) D^{-1}(\xi) \exp\left(i\xi\left(x - x'\right)\right) d\xi dx \tag{1.1.6}$$

$$\varepsilon_{ij}(x) = (2\pi)^{-3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \boldsymbol{C}_{klmn} \varepsilon^*_{mn}(x') \xi_l \left(\xi_l N_{ik}(\xi) + \xi_i N_{jk}(\xi)\right) D^{-1}(\xi) \exp\left(i\xi\left(x - x'\right)\right) d\xi dx$$

(1.1.7)

N et D sont respectivement les cofacteurs et déterminant du tenseur de second ordre K définit comme suit :

$$K_{ik} = \boldsymbol{C}_{ijkl}\xi_l\xi_j \tag{1.1.8}$$

$$D(\xi) = e_{mnl}K_{m1}K_{n2}K_{l3} \tag{1.1.9}$$

$$N_{ij}(\xi) = \frac{1}{2}e_{ikl}e_{imn}K_{km}K_{\ln} \tag{1.1.10}$$

Opérateurs de Green

Démontrons désormais comment l'introduction des fonctions de Green peut s'avérer utile dans la résolution des équations de Navier. Par simple identification avec (1.1.6) notamment on remarque que si l'on définit le tenseur suivant:

$$G_{ij}(x-x') = (2\pi)^{-3}\int_{-\infty}^{\infty} N_{ij}(\xi)D^{-1}(\xi)\exp(i(x-x'))d\xi \tag{1.1.11}$$

Alors les solutions des équations de Navier peuvent s'écrire de la sorte.

$$u_i\left(x\right) = -\int_{-\infty}^{\infty}\boldsymbol{C}_{jlmn}\varepsilon_{mn}^{*}\left(x'\right)G_{ij,l}\left(x-x'\right)dx' \tag{1.1.12}$$

$$\varepsilon_{ij}\left(x\right) = -\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\boldsymbol{C}_{klmn}\varepsilon_{mn}^{*}\left(x'\right)G_{kp,ql}\left(x-x'\right)dx' \tag{1.1.13}$$

$$\varepsilon_{ij}\left(x\right) = -\boldsymbol{C}_{ijkl}\int_{-\infty}^{\infty}\boldsymbol{C}_{pqmn}G_{kp,ql}\left(x-x'\right)dx' + \varepsilon_{kl}^{*}\left(x'\right) \tag{1.1.14}$$

Le tenseur G introduit dans (1.1.11) est dit tenseur de Green. Il sera démontré dans l'annexe d'une manière ne nécessitant pas d'étape d'identification avec un résultat connu que ces fonctions de Green sont solution des équations de Navier.

Opérateurs de Green modifié et Tenseur d'Eshelby

Les expressions (1.1.13) et (1.1.14) peuvent être réécrites d'une manière simplifiée à l'aide de l'introduction du tenseur de Green modifié défini comme suit :

$$\boldsymbol{\Gamma}_{ijkl} = -\frac{1}{4}\left[G_{ik,jl} + G_{jk,il} + G_{il,jk} + G_{jl,ik}\right] \tag{1.1.15}$$

Soit le tenseur intégral suivant :

$$\boldsymbol{S}_{ijkl}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{\Gamma}_{ijmn}\left(x - x'\right) dx' \boldsymbol{C}_{mnkl} \tag{1.1.16}$$

Grâce aux propriétés de symétrie du tenseur de Green modifié, nous pouvons alors lier le tenseur des déformations au tenseur des eigenstrain. Dans le cas où les eigenstrains sont uniformes dans l'inclusion, l'intégration dans (1.1.13) n'est réalisée que sur le volume de l'inclusion et l'on obtient alors :

$$\varepsilon_{ij}(x) = \boldsymbol{S}^{\boldsymbol{E}}_{\boldsymbol{ijkl}}(x)\,\varepsilon^{*}_{kl} \tag{1.1.17}$$

Où $\boldsymbol{S}^{\boldsymbol{E}}_{\boldsymbol{ijkl}}(x)$ est le tenseur d'Eshelby. Précisons l'expression du tenseur d'Eshelby dans le cas d'un comportement isotropique où les inclusions sont sphériques qui sera utilisé dans la suite de notre travail :

$$\boldsymbol{S}^{\boldsymbol{E}}_{\boldsymbol{ijkl}} = \delta_{ij}\delta_{kl}\frac{5\nu - 1}{15(1-\nu)} + \left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{jk}\delta_{il}\right)\frac{2(4-5\nu)}{15(1-\nu)} \tag{1.1.18}$$

Ici, δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

Le tenseur d'Eshelby est donc établi à partir du volume de l'inclusion, ainsi dans les schémas autocohérents on impose aux parties non locales des valeurs intégrales d'être nulles en dehors de l'inclusion. Cette condition permet d'établir des relations local/global afin d'obtenir des expressions relativement simples des tenseurs de localisation.

Exemple d'un cas linéaire élastique.

Dans un souci de clarté, nous résolvons ici à titre d'exemple le cas du problème simple de l'inclusion inhomogène en utilisant le formalisme basé sur les opérateurs de projection de Kunin, qui seront utilisés par la suite dans le cas de comportements viscoplastiques. Dans ce problème, le VER est composé d'une inclusion de tenseur des modules d'élasticité $\boldsymbol{C}_i$ plongée dans une matrice infinie dont le tenseur des modules d'élasticité est noté $\boldsymbol{C}_m$ (voir Figure 0-3). Notons que dans cette section les développements sont

tous écrits sous forme tensorielle afin d'alléger le document. Le VER est soumis à un champ de déformation macroscopique noté E.

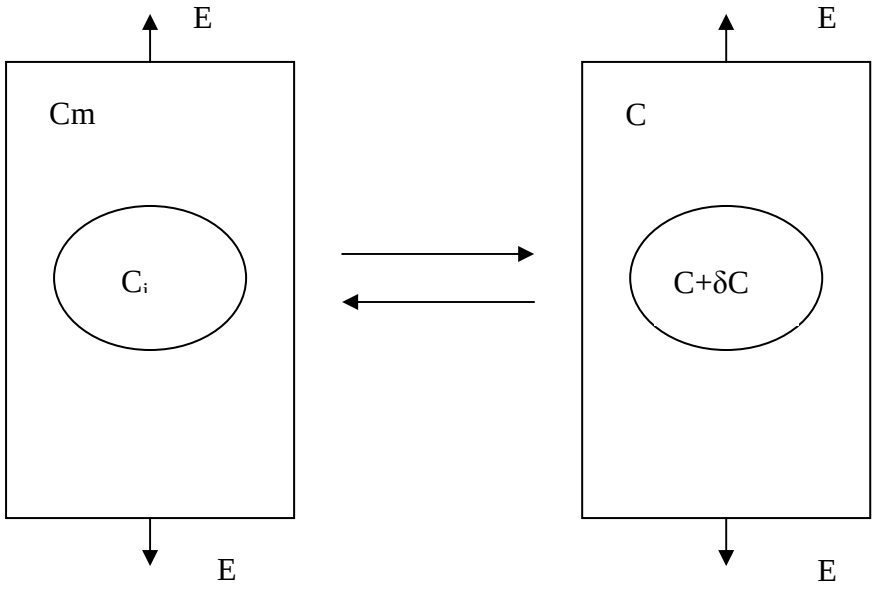


Figure 0-3: VER cas linéaire élastique hétérogène

Rappelons encore que les étapes de localisation et de concentration définies dans la section précédente proviennent des conditions de compatibilité sur le champ de déformation et des conditions d'équilibres sur le champ de contrainte. Or ces conditions peuvent s'écrire avec un formalisme différent basé sur les opérateurs de projection de Kunin définit comme suit dans le cas du problème équivalent décrit dans la Figure 0-3 :

$$\mathbf{\Pi}^{c} = \mathbf{\Gamma}^{C} : \boldsymbol{C} \qquad (1.2.1)$$

Il sera démontré par la suite que les conditions d'équilibre et de compatibilité peuvent s'écrire:

$$div(\sigma) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{\Pi}^{C} \otimes \boldsymbol{S} : \sigma = 0 \qquad (1.2.2)$$

$$\varepsilon = \nabla^{s} u \Leftrightarrow \mathbf{\Pi}^{C} \otimes \varepsilon = \varepsilon - E \qquad (1.2.3)$$

Où la notation $\otimes$ dénote un produit de convolution. Etablissons désormais la solution de ce problème. Il s'agit notamment d'évaluer le tenseur de modules d'élasticité macroscopique. En tout point du VER la loi de Hooke s'écrit comme suit :

$$\sigma(r) = \boldsymbol{c}(r)\varepsilon(r) \tag{1.2.4}$$

Où r dénote les coordonnées d'espace. Transformons le problème de départ en un problème équivalent où l'on suppose le matériau constitué d'une inclusion dont le tenseur des modules d'élasticité est décomposé en la somme d'un terme indépendant des variables d'espaces et d'un terme de fluctuations locales. On obtient ainsi :

$$\boldsymbol{c}(r) = \boldsymbol{C} + \delta\boldsymbol{C}(r) \tag{1.2.5}$$

En appliquant la condition de compatibilité avec le formalisme des opérateurs de projection de Kunin on obtient après un peu d'algèbre:

$$\boldsymbol{\Pi}^C \otimes \boldsymbol{S} : \sigma = \boldsymbol{\Pi}^C \otimes \varepsilon - \boldsymbol{\Pi}^C \otimes \delta\boldsymbol{S} : \boldsymbol{c} : \varepsilon \tag{1.2.6}$$

En appliquant la condition de compatibilité sur l'équation (1.2.6), l'on obtient:

$$\varepsilon = E + \boldsymbol{\Pi}^C \otimes \delta\boldsymbol{S} : \boldsymbol{c} : \varepsilon \tag{1.2.7}$$

Appliquons désormais le schéma autocohérent. L'équation (1.2.7) contient des termes locaux et non locaux inclus dans le terme contenant le produit de convolution, on la décomposera ainsi en leur somme.

$$\varepsilon = E + \boldsymbol{\Pi}_L^C \otimes \delta\boldsymbol{S} : \boldsymbol{c} : \varepsilon + \boldsymbol{\Pi}_{NL}^C \otimes \delta\boldsymbol{S} : \boldsymbol{c} : \varepsilon \tag{1.2.8}$$

Afin d'éviter le calcul des termes non locaux qui peut s'avérer difficile, il s'agit de choisir le tenseur C ou son inverse S telle que la moyenne sur le VER du terme non local soit nul. Ainsi avec les conditions suivantes ; $\bar{\varepsilon} = E$ et $\bar{\sigma} = \Sigma$. Ici les termes sous des barres dénotent des moyennes volumiques, on obtient

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}^e \tag{1.2.9}$$

Attachons nous désormais à définir les relations de localisations. Ainsi en introduisant (1.2.9) dans l'expression (1.2.8) et en tenant compte des propriétés du produit de convolution, on obtient après un peu d'algèbre :

$$\left[\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\Gamma}_L^{Ce} : \left(\boldsymbol{c} - \boldsymbol{C}^e\right)\right] : \varepsilon = E \tag{1.2.10}$$

L'expression de localisation ci dessus peut enfin s'écrire comme suit :

$$\varepsilon = \boldsymbol{A}^{Ce} : E \tag{1.2.11}$$

Ici, A^{Ce} représente le tenseur de localisation de quatrième ordre dont l'expression est la suivante :

$$\boldsymbol{A}^{Ce} = \left[\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\Gamma}_L^{Ce} : \left(\boldsymbol{c} - \boldsymbol{C}^e \right) \right]^{-1} \tag{1.2.12}$$

Enfin d'après $\bar{\varepsilon} = E$ et $\bar{\sigma} = \Sigma$ et avec (1.2.11) on obtient l'expression du tenseur des modules d'élasticité effectif et on réalise donc l'étape d'homogénéisation.

$$\boldsymbol{C}^e = \overline{\boldsymbol{c} : \boldsymbol{A}^{Ce}} \tag{1.2.13}$$

Extension de la solution d'Eshelby dans le cas élasto-viscoplastique

L'approche présentée ci-dessus peut être étendue dans le cas de comportements élasto-viscoplastiques. Le VER sur lequel est basée cette étude est le même que dans le cas du problème du milieu linéaire élastique hétérogène présenté ci-dessus Figure 0-3. Ainsi nous supposerons que le VER est composé d'une unique inclusion ayant un comportement linéaire élastique et viscoplastique différent de celui de la matrice dans laquelle elle est plongée. Ainsi localement, le taux de déformation peut être décomposé en la somme d'une contribution purement élastique et d'une contribution viscoplastique.

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}^e + \dot{\varepsilon}^{vp} \tag{1.3.1}$$

En utilisant la décomposition du module d'élasticité présentée dans la section précédente (équation (1.2.5)) et les propriétés des opérateurs de projection de Kunin, assurant que les conditions de compatibilité et d'équilibre sont respectées, on obtient l'équation suivante :

$$\boldsymbol{\Pi}^C \otimes \boldsymbol{S} : \dot{\sigma} = \dot{\varepsilon} - \dot{\mathbf{E}}^C - \boldsymbol{\Pi}^C \otimes \dot{\varepsilon}^{vp} - \boldsymbol{\Pi}^C \otimes \delta \boldsymbol{S} : \boldsymbol{c} : \dot{\varepsilon}^e = 0 \tag{1.3.2}$$

On admet ici que les propriétés des opérateurs de Kunin sont encore valides lorsqu' elles sont appliquées aux taux de déformation et de contraintes. Décomposons ici le tenseur de taux de déformations viscoplastiques en la somme d'un terme indépendant des variables d'espaces et d'un terme de fluctuation, on obtient alors :

$$\dot{\varepsilon}^{vp}(r) = \dot{E}^{vp} + \delta\dot{\varepsilon}^{vp}(r) \tag{1.3.3}$$

Remarquons ici qu'une projection de (1.3.3), effectuée avec les opérateurs de projection de Kunin, annulera la contribution du terme indépendant des variables d'espaces. Ainsi en utilisant ce résultat, (1.3.2) devient alors :

$$\varepsilon = \dot{E} + \mathbf{\Pi}^{C} \otimes \left[\delta \boldsymbol{S} : \boldsymbol{c} : \dot{\varepsilon}^{e} + \delta \dot{\varepsilon}^{vp} \right] \tag{1.3.4}$$

Comme dans le développement présenté précédemment dans le cas élastique linéaire, la relation (1.3.4) peut se décomposer en la somme d'un terme local et d'un terme non local. On applique alors le schéma autocohérent de sorte à annuler la contribution du terme non local :

$$\overline{\delta \boldsymbol{S} : \boldsymbol{c} : \dot{\varepsilon}^{e} + \delta \dot{\varepsilon}^{vp}} = 0 \tag{1.3.5}$$

On obtient ainsi par identification

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}^{e} \text{ et } \dot{E}^{vp} = \dot{E}^{vpe} \tag{1.3.6}$$

En développant (1.3.4) et en identifiant avec (1.2.12) on obtient alors la relation de concentration suivante :

$$\dot{\varepsilon} = \boldsymbol{A}^{Ce} : \dot{E} + \boldsymbol{A}^{Ce} : \mathbf{\Gamma}_{L}^{Ce} \left[\boldsymbol{c} : \dot{\varepsilon}^{vp} - \boldsymbol{C}^{e} : \dot{E}^{vpe} \right] \tag{1.3.7}$$

Remarquons ici que le développement présenté ici est équivalent au schéma de Kroner, développé dans le cas d'un matériau au comportement élastique homogène. On notera aussi que les termes relatant des taux de déformation viscoplastique sont pondérés par les tenseurs locaux et globaux des modules d'élasticité, ce qui engendre des prédictions relativement « dures » du comportement viscoplastique. Pour remédier à cette limitation le schéma de Berbenni et al., basé sur le couplage temps espace des comportements viscoplastiques sera aussi utilisé. Avant de présenter le développement du schéma sécant de Berbenni et al., présentons désormais le cas d'un milieu purement visqueux qui se révélera nécessaire par la suite.

Cas des comportements purement visqueux

Supposons le VER constitué d'une inclusion viscoplastique plongée dans une matrice viscoplastique de comportement différent. Ainsi, localement, la loi de comportement s'écrit comme suit :

$$\dot{\varepsilon}^{vp} = \boldsymbol{m} : \sigma \tag{1.4.1}$$

Ici $\boldsymbol{m}$ est le tenseur de viscosité de quatrième ordre, on notera $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{m}^{-1}$ son inverse et $\boldsymbol{M}^{e}$ son équivalent global. On définira l'opérateur de Green modifié et les opérateurs de projection de Kunin dans le cas viscoplastique :

$$\boldsymbol{\Gamma}_{L}^{B} = \boldsymbol{S}^{E} : \boldsymbol{B} \text{ et } \boldsymbol{\Pi}^{B} = \boldsymbol{\Gamma}^{B} : \boldsymbol{B} \tag{1.4.2}$$

Dans le cas viscoplastique les conditions d'équilibre et de compatibilité s'écrivent comme suit :

$$div(\sigma) = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{\Pi}^{B} \otimes \boldsymbol{M} : \sigma = 0 \tag{1.4.3}$$

et

$$\varepsilon = \nabla^{s} u \Leftrightarrow \boldsymbol{\Pi}^{C} \otimes \dot{\varepsilon}^{vp} = \dot{\varepsilon}^{vp} - \dot{E}^{vp} \tag{1.4.4}$$

On décompose ensuite le tenseur de viscosité en une partie indépendante des variables d'espaces et une partie fluctuante.

$$\boldsymbol{m}(r) = \boldsymbol{M} + \delta \boldsymbol{m}(r) \tag{1.4.5}$$

On détermine le choix de M approprié et la relation de concentration par un raisonnement semblable au cas linéaire élastique, en insérant (1.4.5) dans (1.4.4) et imposant aux contributions non locales d'être nulles. On obtient ainsi pour le tenseur de viscosité :

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{M}^{e} \tag{1.4.6}$$

et pour la relation de concentration:

$$\dot{\varepsilon}^{vp} = \boldsymbol{A}^{Ce} : \dot{E}^{vpe} \tag{1.4.7}$$

Ici A^{Be} est le tenseur de concentration visqueux de quatrième ordre définit comme suit :

$$\boldsymbol{A}^{Ce} = \left[\boldsymbol{I} + \boldsymbol{S}^{E} : \boldsymbol{B}^{e} : \left(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{B}^{e} \right) \right]^{-1} \tag{1.4.8}$$

Modèle élasto-viscoplastique sécant

Reprenons désormais le développement de Berbenni et al. Le VER est le même que celui utilisé dans le schéma autocohérent. Comme précisé ci-dessus, ce schéma tient compte du couplage temps-espace de la réponse viscoplastique du matériaux. Ainsi on décomposera le comportement local comme suit :

$$\dot{\varepsilon}^{vp}(r,t) = \dot{\tilde{\varepsilon}}^{vp}(r) + \delta\dot{\varepsilon}^{vp}(r,t) \tag{1.5.1}$$

Ainsi le taux de déformation viscoplastique est décomposé en la somme d'un terme indépendant du temps et d'un terme fluctuant dans le temps et l'espaces.

$$\dot{E} = \boldsymbol{S} : \dot{\Sigma} + \dot{\tilde{E}}^{vp} \tag{1.5.2}$$

A partir du schéma autocohérent développé dans la section précédente, l'on obtient :

$$\dot{\tilde{\varepsilon}}^{vp} = \boldsymbol{A}^{Be} : \dot{\tilde{E}}^{vp} \tag{1.5.3}$$

Les propriétés de projection du taux de déformation local moyen s'écrivent:

$$\Pi^{C} \otimes \dot{\tilde{\varepsilon}}^{vp} = \dot{\tilde{\varepsilon}}^{vp} - \dot{\tilde{E}}^{vp} \tag{1.5.4}$$

L'expression (1.3.4) est encore valide dans le cas présent et avec (1.5.1) on obtient alors :

$$\varepsilon = \dot{E} + \boldsymbol{\Pi}^{C} \otimes \left[\delta\boldsymbol{S} : \boldsymbol{c} : \dot{\varepsilon}^{e} + \dot{\tilde{\varepsilon}}^{vp} + \delta\dot{\varepsilon}^{vp} \right] \tag{1.5.5}$$

Avec les propriétés de projection (1.5.5) devient:

$$\varepsilon = \dot{E} + \boldsymbol{A}^{B} : \dot{\tilde{E}}^{vp} - \dot{\tilde{E}}^{vp} + \boldsymbol{\Pi}^{C} \otimes \left[\delta\boldsymbol{S} : \boldsymbol{c} : \dot{\varepsilon}^{e} + \delta\dot{\varepsilon}^{vp} \right] \tag{1.5.6}$$

On utilise désormais le schéma autocohérent afin d'obtenir les relations locales globales. En imposant aux contributions non locales d'être nulles, on obtient la condition suivante :

$$\overline{\delta\boldsymbol{S} : \boldsymbol{c} : \dot{\varepsilon}^{e} + \delta\dot{\varepsilon}^{vp}} = 0 \tag{1.5.7}$$

Avec les conditions de macrohomogénétité on détermine les tenseurs moyens :

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}^{e}$$

et (1.5.8)

$$\dot{\tilde{E}}^{vp} = \dot{E}^{vpe}$$

Avec les relations précédentes les relations de concentration deviennent alors :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{A}^{Ce} : \left(\dot{E} - \dot{E}^{vpe}\right) + \boldsymbol{A}^{Ce} : \boldsymbol{A}^{Be} : \dot{E}^{vpe} + \boldsymbol{A}^{Ce} : \boldsymbol{S}^{E} : \boldsymbol{S}^{e} : \left[\boldsymbol{c} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} - \boldsymbol{C}^{e} : \boldsymbol{A}^{Be} : \dot{E}^{vpe}\right] \quad (1.5.9)$$

En appliquant la loi de Hooke on obtient simplement :

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{c} : \boldsymbol{A}^{Ce} : \boldsymbol{S}^{e} : \dot{\Sigma} + \boldsymbol{c} : \boldsymbol{A}^{Ce} : \left(\boldsymbol{S}^{E} - \boldsymbol{I}\right) : \left(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} - \boldsymbol{A}^{Be} : \dot{E}^{vpe}\right) \quad (1.5.10)$$

Les opérateurs de Green

Dans cette annexe, nous établissons la forme des opérateurs de Green tel que leurs dérivés secondes soient solution des équations de Navier. On écrit les équations de Navier en utilisant la convention de l'indice muet de Einstein et on démontre le résultat suivant:

$$\boldsymbol{C}_{ijkl} G_{km,lj}(x-x') + \delta_{im}\delta(x-x') = 0 \tag{1.5.11}$$

Où δ_{im} est l'indice de Kronecker, $\delta(x-x')$ est la fonction de Dirac, $\boldsymbol{C}_{ijkl}$ est le tenseur des modules d'élasticités. x et x' définissent les coordonnées spatiales de deux points matériels. Les opérateurs de Green s'écrivent comme suit :

$$G_{ij}\left(x-x'\right) = \left(2\pi\right)^{-3}\int_{-\infty}^{\infty} N_{ij}\left(\xi\right) D^{-1}\left(\xi\right)\exp\left(i\left(x-x'\right)\right)d\xi \tag{1.5.12}$$

avec la définition de la matrice K suivante :

$$K_{ik} = C_{ijkl}\xi_l\xi_j \tag{1.5.13}$$

Le déterminant de K et ses cofacteurs sont donnés respectivement par :

$$D(\xi) = e_{mnl}K_{m1}K_{n2}K_{l3} \tag{1.5.14}$$

et

$$N_{ij}\left(\xi\right) = \frac{1}{2}e_{ikl}e_{jm\mathrm{n}}K_{km}K_{\mathrm{ln}} \tag{1.5.15}$$

Où e_{ikl} est le tenseur des permutations. En introduisant la relation (1.5.12) dans le terme de gauche de l'expression (1.5.11) on obtient la relation suivante :

$$C_{ijkl}G_{km,lj}(x-x') = -(2\pi)^3\int_{-\infty}^{\infty} C_{ijkl}N_{km}D^{-1}\xi_l\xi_j\exp(i(x-x'))d\xi \tag{1.5.16}$$

On peut identifier la matrice K dans l'expression (1.5.16). La définition de l'inverse d'un matrice à partir de son déterminant et de ses cofacteurs est donnée par :

$$K_{ij}^{-1} = \frac{N_{ij}(\xi)}{D(\xi)} \tag{1.5.17}$$

Avec l'expression (1.5.17) l'équation (1.5.16) devient alors :

$$C_{ijkl} G_{km,lj}(x - x') = -(2\pi)^{-3} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_{im} \exp(i\xi(x - x'))d\xi \tag{1.5.18}$$

En considérant l'expression sous forme de somme de Fourier de la fonction de Dirac, l'égalité (1.5.11) est donc démontrée.

Ainsi ce raisonnement démontre que l'opérateur de Green correspond physiquement au déplacement dans la direction « k » (avec l'écriture (1.5.18)) engendré par une force de valeur unité appliquée dans la direction « i ».

Propriétés des opérateurs de projection de Kunin

Dans ce qui suit on s'attache à démontré la propriété d'équivalence des opérateurs de projection de Kunin suivante :

Condition d'équilibre

$$div(\sigma) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{\Pi}^C \otimes \boldsymbol{S} : \sigma = 0 \tag{1.5.19}$$

Rappelons tout d'abord l'expression des opérateurs de projection de Kunin :

$$\mathbf{\Pi}^c = \mathbf{\Gamma}^C : \boldsymbol{C} \tag{1.5.20}$$

où l'opérateur de Green modifié s'écrit comme suit :

$$\mathbf{\Gamma}_{ijkl} = -\frac{1}{4}\left[G_{ik,jl} + G_{jk,il} + G_{il,jk} + G_{jl,ik}\right] \tag{1.5.21}$$

Si $div(\sigma) = 0$ démontrons que l'on a $\mathbf{\Pi}^C \otimes \boldsymbol{S} : \sigma = 0$.

Le produit de convolution peut être réécrit comme suit :

$$\mathbf{\Pi}^{C} \otimes \boldsymbol{S} : \sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{\Pi}^{C}\left(r - r^{'}\right) : \left[\boldsymbol{S} : \sigma\right]\left(r^{'}\right) dr^{'} \tag{1.5.22}$$

Procédons désormais à une intégration par partie, on obtient :

$$\mathbf{\Pi}^{C} \otimes \boldsymbol{S} : \sigma = \left[\mathbf{\Pi}^{C,\text{int}} : \boldsymbol{S} : \sigma\right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{\Pi}^{C}\left(r - r^{'}\right) : \frac{\partial\left[\boldsymbol{S} : \sigma\right]\left(r^{'}\right)}{\partial r^{'}} dr^{'} \tag{1.5.23}$$

Où $\mathbf{\Pi}^{C,\text{int}}$ est définit comme suit :

$$\mathbf{\Pi}^{C,\text{int}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{\Gamma}^{c} : \boldsymbol{C}\left(r - r'\right) dr' \tag{1.5.24}$$

Dans le cas où l'eigenstrain est constant dans l'inclusion (1.5.24) s'écrit comme suit :

$$\mathbf{\Pi}^{C,\text{int}} = \boldsymbol{S}^{E} \tag{1.5.25}$$

Avec (1.5.25), l'expression (1.5.23) est réécrite comme suit :

$$\begin{aligned} \mathbf{\Pi}^{C} \otimes \boldsymbol{S} : \sigma &= \left[\boldsymbol{S}^{E} : \boldsymbol{S} : \sigma\right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty-r}^{+\infty+r} \mathbf{\Pi}^{C}\left(r - r^{'}\right) : \boldsymbol{S} : \frac{\partial\left[\sigma\right]\left(r^{'}\right)}{\partial r^{'}} dr^{'} \\ &+ \int_{-r}^{+r} \mathbf{\Pi}^{C}\left(r - r^{'}\right) : \left(\boldsymbol{S} + \delta\boldsymbol{S}\right) : \frac{\partial\left[\sigma\right]\left(r^{'}\right)}{\partial r^{'}} dr^{'} \end{aligned} \tag{1.5.26}$$

La relation $\mathbf{\Pi}^{C} \otimes \boldsymbol{S} : \sigma = 0$ est induite par l'application de la loi de Hooke dans le premier terme de l'expression (1.5.26) et par le fait que les champs de déformation imposés aux limites sont opposés et par l'hypothèse de nullité de la divergence du champ de contraintes.

Si $\mathbf{\Pi}^{C} \otimes \boldsymbol{S} : \sigma = 0$ démontrons que l'on a $div(\sigma) = 0$:

La relation inverse peut être simplement démontrée à partir de l'expression(1.5.26). En effet avec la loi de Hooke et les conditions aux limites sur les champs de déformation, on obtient :

$$\begin{aligned}\mathbf{\Pi}^{C} \otimes \boldsymbol{S} : \sigma &= -\int_{-\infty-r}^{+\infty+r} \mathbf{\Pi}^{C}\left(r - r^{'}\right) : \boldsymbol{S} : \frac{\partial[\sigma]\left(r^{'}\right)}{\partial r^{'}} dr^{'} \\ &-\int_{-r}^{+r} \mathbf{\Pi}^{C}\left(r - r^{'}\right) : \left(\boldsymbol{S} + \delta\boldsymbol{S}\right) : \frac{\partial[\sigma]\left(r^{'}\right)}{\partial r^{'}} dr^{'} = 0\end{aligned} \tag{1.5.27}$$

L'expression ci-dessus impose que la divergence du champ de contraintes soit nulle.

Annexe du Chapitre IV: Effet des mécanismes de diffusion

Préliminaires: Caractéristiques des tenseurs de projection K et J

Dans le cas isotropique, les tenseurs de quatrième ordre peuvent tous s'écrire sous la forme suivante:

$$\boldsymbol{F}_{ijkl} = a_1 \boldsymbol{K}_{ijkl} + a_2 \boldsymbol{J}_{ijkl} \tag{2.1.1}$$

Où a_1 et a_2 sont des constantes et les tenseurs de quatrième ordre $\boldsymbol{K}$ et $\boldsymbol{J}$ définissent les parties déviatoriques et hydrostatiques du tenseur $\boldsymbol{F}$ et sont définis comme suit:

$$\boldsymbol{J}_{ijkl} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl} \tag{2.1.2}$$

et

$$\boldsymbol{K}_{ijkl} = \boldsymbol{I}_{ijkl} - \boldsymbol{J}_{ijkl} \tag{2.1.3}$$

Où $\boldsymbol{I}$ est le tenseur identité de quatrième ordre défini comme suit :

$$\boldsymbol{I}_{ijkl} = \frac{1}{2}\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}\right) \tag{2.1.4}$$

Démontrons les propriétés suivantes :

$$\boldsymbol{J} : \boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}$$

$$\boldsymbol{K} : \boldsymbol{K} = \boldsymbol{K} \tag{2.1.5}$$

$$\boldsymbol{K} : \boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}$$

La première propriété est obtenu directement avec le développement de l'expression de $\boldsymbol{J}$:

$$\boldsymbol{J}_{ijkl}\boldsymbol{J}_{klmn} = \frac{1}{9}\delta_{ij}\delta_{kl}\delta_{kl}\delta_{mn} = \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{mn} = \boldsymbol{J}_{ijmn} \tag{2.1.6}$$

La seconde propriété s'obtient directement à l'aide de (2.1.6):

$$\boldsymbol{K}_{ijkl}\boldsymbol{K}_{klmn} = \left(\boldsymbol{I}_{ijkl} - \boldsymbol{J}_{ijkl}\right)\left(\boldsymbol{I}_{klmn} - \boldsymbol{J}_{klmn}\right) = \boldsymbol{I}_{ijmn} - 2\boldsymbol{J}_{ijmn} + \boldsymbol{J}_{ijmn} \tag{2.1.7}$$

Enfin, la dernière propriété est aussi une conséquence directe de (2.1.6) :

$$\boldsymbol{K}_{ijkl}\boldsymbol{J}_{klmn} = \left(\boldsymbol{I}_{ijkl} - \boldsymbol{J}_{ijkl}\right)\boldsymbol{J}_{klmn} = \boldsymbol{J}_{ijmn} - \boldsymbol{J}_{ijmn} = 0 \tag{2.1.8}$$

Développement du modèle dans le cas isotropique incompressible

Expression des tenseurs de concentrations

Dans le schéma micromécanique de Cherkaoui et al., présenté dans le chapitre dédié aux techniques de transition d'échelles, les tenseurs de localisation sont écrits comme suit :

$$\boldsymbol{A}^{Ce} = \left[\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\Gamma}_L^{Ce} : \left(\boldsymbol{c} - \boldsymbol{C}^e\right)\right]^{-1} \tag{2.1.9}$$

Etablissons les constantes N^{C*} et M^{C*} tel que le tenseur de localisation s'écrive comme suit :

$$\boldsymbol{A}^{Ce} = N^C\boldsymbol{K} + M^C\boldsymbol{J} \tag{2.1.10}$$

Comme présenté dans le chapitre dédié à la transition d'échelles, dans le cas d'inclusions sphériques et dans le cas de matériaux isotropes, le tenseur d'Eshelby, $\boldsymbol{S}^E$, s'écrit comme suit :

$$\boldsymbol{S}^E = \alpha\boldsymbol{K} + \beta\boldsymbol{J} \tag{2.1.11}$$

Où les constantes α et β sont définies par :

$$\alpha = \frac{1}{3}\frac{1+\nu}{1-\nu} \tag{2.1.12}$$

et

$$\beta = \frac{2}{15}\frac{4-5\nu}{1-\nu} \tag{2.1.13}$$

Les tenseurs des modules d'élasticités s'écrivent dans notre cas :

$$\boldsymbol{C}^e = 2\mu\boldsymbol{K} + 3k^e\boldsymbol{J} \tag{2.1.14}$$

Avec les propriétés des tenseurs $\boldsymbol{K}$ et $\boldsymbol{J}$ l'inverse de $\boldsymbol{C}^e$ s'écrit comme suit :

$$\left(\boldsymbol{C}^e\right)^{-1} = \frac{1}{2\mu^e}\boldsymbol{K} + \frac{1}{3k^e}\boldsymbol{J} \tag{2.1.15}$$

Avec l'expression des opérateurs de Green modifié, l'inverse du tenseur de concentration $\boldsymbol{A}^{Ce}$ s'écrit comme suit:

$$(\boldsymbol{A}^{Ce})^{-1} = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{S}^E : (\boldsymbol{C}^e)^{-1} : (\boldsymbol{C}^r - \boldsymbol{C}^e) = \boldsymbol{K} + \boldsymbol{J} + (\alpha\boldsymbol{J} + \beta\boldsymbol{K}) : (\frac{1}{2\mu^e}\boldsymbol{K} + \frac{1}{3k^e}\boldsymbol{J}) : (\boldsymbol{C}^r - \boldsymbol{C}^e)$$

(2.1.16)

Avec (2.1.5), (2.1.16) devient :

$$(\boldsymbol{A}^{Ce})^{-1} = \boldsymbol{K} + \boldsymbol{J} + (\frac{\beta}{2\mu^e}\boldsymbol{K} + \frac{\alpha}{3k^e}\boldsymbol{J}) : (3(k^r - k^e)\boldsymbol{J} + 2(\mu^r - \mu^e)\boldsymbol{K}) \tag{2.1.17}$$

On simplifie (2.1.17) afin d'obtenir l'expression suivante :

$$(\boldsymbol{A}^{Ce})^{-1} = \frac{(\mu^r - \mu^e)\beta + \mu^e}{\mu^e}\boldsymbol{K} + \frac{(k^r - k^e)\alpha + k^e}{k^e}\boldsymbol{J} \tag{2.1.18}$$

Avec les propriétés des tenseurs $\boldsymbol{K}$ et $\boldsymbol{J}$ on obtient l'expression des constantes définissant le tenseur de localisation :

$$N^{Ce} = \frac{\mu^e}{(\mu^r - \mu^e)\beta + \mu^e} \tag{2.1.19}$$

$$M^{Ce} = \frac{k^e}{(k^r - k^e)\alpha + k^e} \tag{2.1.20}$$

Expression du taux de déformation viscoplastique global

Dans le schéma autocohérent de Cherkaoui et al., le taux de déformation viscoplastique est donné par la relation suivante :

$$\dot{E}^{vpe} = f \cdot \left(\boldsymbol{C}^{e}\right)^{-1} : \boldsymbol{A}^{CeI} : \boldsymbol{C}^{I} : \dot{\varepsilon}^{vpI} \tag{2.1.21}$$

Evaluons cette expression dans le cas isotropique incompressible. Tout d'abord nous avons :

$$\left(\boldsymbol{C}^{e}\right)^{-1} : \boldsymbol{A}^{CeI} : \boldsymbol{C}^{I} = \left(\frac{1}{2\mu^{e}}\boldsymbol{K} + \frac{1}{3k^{e}}\boldsymbol{J}\right) : \left(N^{C}\boldsymbol{K} + M^{C}\boldsymbol{J}\right) : \left(2\mu^{I}\boldsymbol{K} + 3k^{I}\boldsymbol{J}\right) \tag{2.1.22}$$

Avec les propriétés (2.1.5) l'expression (2.1.22) se simplifie et on obtient :

$$\dot{E}^{vpe} = f \cdot \left(\frac{\mu^{I} N^{C}}{\mu^{e}}\boldsymbol{K} + \frac{M^{C} k^{I}}{k^{e}}\boldsymbol{J}\right) : \dot{\varepsilon}^{vpI} \tag{2.1.23}$$

Dans le cas incompressible, la trace du tenseur de déformation viscoplastique est nulle, ainsi :

$$\boldsymbol{J} : \dot{\varepsilon}^{vpI} = 0 \tag{2.1.24}$$

On obtient :

$$\dot{E}^{vpe} = f \cdot \frac{\mu^{I} N^{C}}{\mu^{e}}\boldsymbol{K} : \dot{\varepsilon}^{vpI} \tag{2.1.25}$$

Soit en notation indicielle et avec $\boldsymbol{K} : \dot{\varepsilon}^{vpI} = \dot{\varepsilon}^{vpI}$ ((2.1.26)) et le fait que $\nu = 0.5$:

$$\dot{E}^{vpe}_{n+1} = f \cdot \frac{5\mu^{I}}{2\mu^{I} + 3\mu^{e}} \dot{\varepsilon}^{vpI}_{n+1} \tag{2.1.27}$$

Evaluation des tenseurs de localisation de second ordre

Les tenseurs de concentration de second ordre sont exprimés comme suit :

$$a^r = \boldsymbol{A}^{Cer} : \boldsymbol{S}^E : \left(\boldsymbol{C}^e\right)^{-1} : \left(\boldsymbol{C}^r \dot{\varepsilon}^{vpr} - \boldsymbol{C}^e : \dot{E}^{vpe}\right) \tag{2.1.28}$$

Nous développons ici l'expression de a^r dans le cas isotropique incompressible. En développant les tenseurs de quatrième ordre à l'aide des tenseurs $\boldsymbol{J}$ et $\boldsymbol{K}$ et avec la propriété (2.1.24) on obtient :

$$a^r = \frac{\beta \cdot N^C}{2\mu^e} \boldsymbol{K} : \left(2\mu^I \boldsymbol{K} : \dot{\varepsilon}^{vpr} - 2\mu^e \boldsymbol{K} : \dot{E}^{vpe}\right) \tag{2.1.29}$$

Avec (2.1.26), l'expression (2.1.29) se simplifie et on obtient de manière indicielle :

$$a_{ij}^I = \frac{1}{2\mu^I + 3\mu^e}\left(2\mu^I \dot{\varepsilon}_{ij}^{vpr} - 2\mu^e \dot{E}_{ij}^{vpe}\right) \tag{2.1.30}$$

De même on a dans le cas de la phase matrice :

$$a_{ij}^M = \frac{-2\mu^e}{2\mu^M + 3\mu^e} \dot{E}_{ij}^{vpe} \tag{2.1.31}$$

Evaluation des lois de comportements

Les lois de comportements sont toutes écrites de la forme suivante :

$$\dot{\Sigma} = \boldsymbol{C} : \left(\dot{E} - \dot{E}^{vpe}\right) \tag{2.1.32}$$

Dans le cas isotropique incompressible on obtient après simplification l'écriture suivante des lois de comportement :

$$\dot{\Sigma}_{ij} = \boldsymbol{2\mu^e} \left(\dot{E}_{ij} - \dot{E}_{ij}^{vpe}\right) \tag{2.1.33}$$

De même dans le cas de la phase inclusion on obtient :

$$\dot{\sigma}_{ij}^{I} = \boldsymbol{2\mu^{I}} \left(\dot{\varepsilon}_{ij}^{I} - \dot{\varepsilon}_{ij}^{vpI} \right) \qquad (2.1.34)$$

Et dans le cas de la phase matrice :

$$\dot{\sigma}_{ij}^{M} = \boldsymbol{2\mu^{M}} \dot{\varepsilon}_{ij}^{M} \qquad (2.1.35)$$

$$C^{e} = 3k^{e} J + 2\mu^{e} K$$

Evaluation des propriétés effectives

La dernière étape de ce développement consiste à définir les propriétés élastiques effectives du matériau. Dans le cas isotrope incompressible, seul le module de cisaillement effectif est inconnu. Le tenseur des modules d'élasticité est donné par la relation suivante :

$$\boldsymbol{C}^{e} = \overline{\boldsymbol{C}^{r} \boldsymbol{A}^{Cer}} \qquad \text{avec r=I,M} \qquad (2.1.36)$$

On développe cette relation afin d'obtenir l'expression suivante :

$$\boldsymbol{C}^{e} = f \cdot \boldsymbol{C}^{I} \boldsymbol{:} \boldsymbol{A}^{CeI} + (1-f) \cdot \boldsymbol{C}^{M} \boldsymbol{A}^{CeM} \qquad (2.1.37)$$

En utilisant la propriété suivante induite par le schéma autocohérent :

$$\overline{\boldsymbol{A}^{Ce}} = \mathbf{I} = f\,\overline{\boldsymbol{A}^{CeI}} + (1-f)\overline{\boldsymbol{A}^{CeM}} \qquad (2.1.38)$$

On développe l'expression (2.1.36) à l'aide de l'écriture des tenseurs de concentration présentée dans (2.1.10) on obtient :

$$\boldsymbol{C}^{e} = \boldsymbol{C}^{M} + f(\boldsymbol{C}^{I} - \boldsymbol{C}^{M})\boldsymbol{A}^{CeI} = 3k^{M} J + \mu^{M} \boldsymbol{K} + 2\,fN^{CI}(\mu^{I} - \mu^{M})\boldsymbol{K} + 3\,fM^{CI}(k^{I} - k^{M})\boldsymbol{J})$$

(2.1.39)

Nous ne sommes intéressés que par partie déviatorique de l'expression (2.1.39) ainsi par identification avec (2.1.14) on obtient la relation implicite liant le module de cisaillement effectif aux modules de cisaillement locaux définie comme suit :

$$\mu^e = \mu^M + f(\mu^I - \mu^M)\frac{\mu^e}{\mu^e + \beta(\mu^I - \mu^e)} \tag{2.1.40}$$

Schéma numérique

L'implémentation numérique des développements présentés ci-dessus est réalisée de manière simple à l'aide d'un schéma explicite de Euler. Nous considérons uniquement les composantes « 11 » des tenseurs définis ci-dessus. Cette simplification n'est faite que dans les calculs se rapportant au chapitre IV. Dans le chapitre V, l'implémentation numérique est réalisée de manière tridimensionnelle. Le code est écrit en Fortran et est décomposé en subroutines afin d'en faciliter la compréhension et l'adaptation à d'autres problèmes. De plus, le programme est totalement automatisé. Ainsi en un seul calcul le programme détermine les réponses du matériau pour toutes les tailles de grains et conditions expérimentales et paramétriques désirées (e.g., taux de déformation macroscopique imposé…). Le temps de calcul est très raisonnable (~30 mn) et une étude paramétrique du pas de temps a été réalisée afin de s'assurer de la convergence du code. Nous présenterons désormais le schéma numérique employé.

L'intégration temporelle

Comme précisé ci-dessus les intégration numérique sont réalisées de manière explicite à l'aide d'un schéma simple non centré. Soit y une variable, on définit sa dérivé temporelle comme suit :

$$\dot{y} = \frac{dy}{dt} \approx \frac{\Delta y}{\Delta t} \tag{2.1.41}$$

Ainsi, si l'indice « n » dénote la valeur de la variable y au pas de temps « n », on obtient la valeur de y à « n+1 » à partir de sa dérivé au temps « n » à l'aide de :

$$y_{n+1} = \dot{y}_n \Delta t + y_n \tag{2.1.42}$$

Ce schéma numérique n'est évidemment pas le plus raffiné mais il remplit les conditions requises (convergence, précision, rapidité). Notons qu'une version non automatisée du code basé sur la méthode implicite de trapèze a aussi été implémentée. Les deux méthodes s'avèrent être d'une performance équivalente. C'est donc pour une raison de simplicité de programmation, notamment du code automatisé que l'on choisit ce schéma numérique.

Calcul du coefficient de cisaillement effectif

L'évaluation du coefficient de cisaillement effectif du matériau se réduit celle de la racine de l'équation suivante :

$$\mu^e - \mu^M + f(\mu^I - \mu^M)\frac{\mu^e}{\mu^e + \beta(\mu^I - \mu^e)} = 0 \qquad (2.1.43)$$

De nombreuses méthode numérique peuvent être appliquées afin d'évaluer la racine d'une telle équation (e.g. méthode sécante, méthode de Newton, méthode de la bissection). Nous choisissons ici la méthode de la bissection qui bien qu'élémentaire permet d'obtenir des prédictions très satisfaisantes avec des temps de calcul acceptable. Notons tout de même que l'utilisation de la méthode de Newton pourrait s'avérer utile dans le cas de problème plus compliqués. Rappelons très brièvement la méthode des bissections.

Soit «f(x)» la fonction dont nous cherchons à évaluer les racines qui est comprise les points a et b. Nous raffinons l'intervalle dans lequel la racine est comprise par la procédure suivante :
Un intervalle $[a_{i+1}, b_{i+1}]$ contenant une approximation de la racine de f(x) est construit à partir d'un intervalle $[a_i, b_i]$ en définissant :

$$p_i = a_i + \frac{b_i - a_i}{2} \qquad (2.1.44)$$

et en définissant par la suite

$a_{i+1} = a_i$ et $b_{i+1} = p_i$ si $f(a_i) \cdot f(p_i) < 0$

sinon on définit alors,

$b_{i+1} = b_i$ et $a_{i+1} = p_i$

Réponse du matériau

Nous présentons dans cette section de l'annexe la procédure numérique suivit. Avec le schéma numérique choisi, la connaissance des conditions initiales est requise. Puisque les modèles du chapitre IV sont tous deux élasto-viscoplastiques, les conditions initiales ne présentent pas d'ambiguïté.

Ainsi au temps n=0 tous les tenseurs de déformation (élastiques comme viscoplastiques) et les tenseurs de contraintes locaux et globaux sont nuls à l'exception du tenseur des taux de déformation global qui est fixé à une valeur choisie. La densité de dislocation initiale qui dans ce cas seulement est normalisée par rapport à la valeur initiale est évidemment égale à 1.

Nous présentons ici le schéma numérique choisi, l'écriture est réalisée dans le cas général (e.g. à un temps « n » non nul). La première étape s'obtient aisément avec les conditions initiales présentées ci-dessus.

A l'étape « n » nous connaissons les tenseurs de déformations totale et viscoplastique globaux. Ainsi, on détermine les contraintes globales au temps « n+1 » à 'aide de (2.1.33) et l'on obtient :

$$\dot{\Sigma}n = \boldsymbol{2}\mu^{\boldsymbol{e}}\left(\dot{E}_n - \dot{E}_n^{vpe}\right) \tag{2.1.45}$$

$$E_{n+1} = \dot{E}_n \Delta t + E_n \tag{2.1.46}$$

$$\Sigma_{n+1} = \dot{\Sigma}_n \Delta t + \Sigma_n \tag{2.1.47}$$

Afin d'obtenir les taux de déformation locaux aux temps « n » on évalue les tenseurs de concentration de second ordre à l'aide de (2.1.30) et (2.1.31), on obtient :

Pour la phase inclusionnaire :

$$a_n^I = \frac{1}{2\mu^I + 3\mu^e}\left(2\mu^I \dot{\varepsilon}_n^{vpr} - 2\mu^e \dot{E}_{in}^{vpe}\right) \tag{2.1.48}$$

Pour la phase matrice :

$$a_n^M = \frac{-2\mu^e}{2\mu^M + 3\mu^e}\dot{E}_n^{vpe} \tag{2.1.49}$$

Les tenseurs de localisation de quatrième ordre ne dépendent pas de l'état de déformation du matériau car ils décrivent les effets locaux de la différence dans les comportements élastiques des deux constituants. Ainsi, les taux de déformation locaux au temps « n » sont donnés par :

$$\dot{\varepsilon}_n^r = \boldsymbol{A}^r \dot{E}_n + a_n^r \qquad \text{avec r=I,M} \tag{2.1.50}$$

Les déformations locales sont obtenues par intégration :

$$\varepsilon_{n+1}^{r} = \dot{\varepsilon}_{n}^{r}\Delta t + \varepsilon_{n}^{r} \qquad \text{avec r=I,M} \qquad (2.1.51)$$

On obtient l'état de contrainte aux temps « n+1 » à partir des lois de comportements locales :

Pour la phase inclusionnaire :

$$\dot{\sigma}_{n}^{I} = \boldsymbol{C}^{I} : \left(\dot{\varepsilon}_{n}^{I} - \dot{\varepsilon}_{n}^{vpI}\right) \qquad (2.1.52)$$

Pour la phase matrice

$$\dot{\sigma}_{n}^{M} = \boldsymbol{C}^{M} : \dot{\varepsilon}_{n}^{M} \qquad (2.1.53)$$

Avec l'appui de la procédure d'intégration temporelle présentée ci-dessus on obtient :

$$\sigma_{n+1}^{r} = \dot{\sigma}_{n}^{r}\Delta t + \sigma_{n}^{r} \qquad \text{avec r=I,M} \qquad (2.1.54)$$

Deux étapes sont encore nécessaires afin de définir complètement l'état du matériau au temps « n+1 » ; l'évaluation des taux de déformation viscoplastiques locaux et l'actualisation de la densité de dislocation normalisée. Les taux de déformation viscoplastiques sont donnés par :

Dans le cas du glissement des dislocations

$$\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{n+1}}^{dis} = \dot{\varepsilon}^{*}\left(\frac{\sigma_{eq,n+1}^{I}}{\sigma_{eq}^{I}}\right)^{m} \rho_{n}^{-m/2} \qquad (2.1.55)$$

Notons que dans l'expression ci-dessus, et pour être rigoureux, nous devrions prendre en compte la densité de dislocation à l'étape « n+1 ». Or cette dernière dépend implicitement du taux de déformation viscoplastique à l'étape « n+1 ». Cependant avec les taux de déformations imposées, on ne constate pas de changement rapide de la densité de dislocation. Ainsi une méthode de calcul implicite ne s'avère pas nécessaire.

Dans le cas du fluage de Coble

$$\dot{\varepsilon}_{\boldsymbol{n+1}}^{Co} = \frac{14 \cdot \pi \cdot \Omega_{c} \cdot w \cdot D_{bd}^{sd} \cdot \sigma_{eq,n+1}^{I}}{k \cdot T \cdot d^{3}} \qquad (2.1.56)$$

Ainsi, on obtient le taux de déformation viscoplastique équivalent par la somme des deux termes évalués précédemment. Avec la loi d'écoulement de Prandtl Reuss on obtient le taux de déformation viscoplastique de la phase inclusionnaire :

$$\dot{\varepsilon}_{n+1}^{\boldsymbol{vpI}} = \frac{3}{2}\frac{\dot{\varepsilon}_{eq,n+1}^{vpI}}{\sigma_{eq,n+1}^{I}}\sigma_{dev,n+1}^{I} \tag{2.1.57}$$

On obtient le taux de déformation viscoplastique effectif à partir de (2.1.27).

$$\dot{E}_{n+1}^{vpe} = f \cdot \frac{5\mu^{I}}{2\mu^{I} + 3\mu^{e}}\dot{\varepsilon}_{n+1}^{vpI}$$

Enfin, actualisons la densité de dislocations. Dans un premier temps nous réécrivons l'expression de la densité de dislocation comme suit :

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon^{dis}} = \frac{d\rho}{dt}\frac{dt}{d\varepsilon^{dis}} = C + C_1\sqrt{\rho} - C_{20}\left(\frac{\dot{\varepsilon}^{dis}}{\dot{\varepsilon}^{*}}\right)^{-1/n} \cdot \rho \tag{2.1.58}$$

La taux d'évolution de la densité de dislocations au temps « n » peut donc être écrit comme suit :

$$\dot{\rho}_n = \left(C + C_1\sqrt{\rho_n} - C_{20}\left(\frac{\dot{\varepsilon}_n^{dis}}{\dot{\varepsilon}^{*}}\right)^{-1/n} \cdot \rho_n\right)\dot{\varepsilon}_n^{dis} \tag{2.1.59}$$

Ainsi on peut actualiser la densité de dislocation par une simple intégration numérique :

$$\rho_{n+1} = \dot{\rho}_n \Delta t + \rho_n$$

Le schéma numérique est donc complètement défini par les équations présentées ci-dessus.

Annexe du chapitre V: Modélisation de l'émission de dislocations

Développement du modèle continu

Dans cette annexe nous présentons les développements analytiques nécessaires à l'implémentation numérique du modèle développé dans le chapitre V, traitant de l'effet de l'émission de dislocations par les joints de grains. Notons que le code développé ici diffère largement du premier code développé. En effet, dans le cas présent, le comportement du matériau est programmé de manière totalement tridimensionnelle, ce qui évidemment nuit à la rapidité du calcul. Cependant ici encore les temps de calculs restent raisonnable (<1h dans le cas de la procédure automatisée). Ainsi le code développé peut aisément être modifié pour simuler d'autres états de déformation macroscopique imposée (e.g. cisaillement pure…).
Calcul des propriétés effectives

Dans le cas isotrope incompressible le tenseurs des modules d'élasticité est donné par (2.1.14) et le module de cisaillement effectif est décrit par (2.1.40). Précisons que dans le cas où le matériau ne serait pas incompressible, le module de compressibilité effectif serait alors donné par :

$$k^e = k^M + f(k^I - k^M)\frac{k^e}{k^e + \alpha(k^I - k^e)} \tag{3.1.1}$$

Le tenseur des modules de viscosité du matériau est lui aussi isotropique et l'on peut donc l'écrire de la sorte :

$$\boldsymbol{B}^e = 3\gamma^e \boldsymbol{J} + 2\eta^e \boldsymbol{K} \tag{3.1.2}$$

A l'aide d'un raisonnement identique à celui présenté dans le cas de l'évaluation des propriétés élastiques effective on obtient après calcul l'expression des deux coefficient η^e et γ^e :

$$\eta^e = \eta^M + f(\eta^I - \eta^M)\frac{\eta^e}{\eta^e + \beta(\eta^I - \eta^e)} \tag{3.1.3}$$

et

$$\gamma^e = \gamma^M + f(\gamma^I - \gamma^M)\frac{\gamma^e}{\gamma^e + \alpha(\gamma^I - \gamma^e)} \tag{3.1.4}$$

Notons que le coefficient de viscosité η^e dépend des taux de déformation viscoplastiques et doit donc être réévalué à chaque pas de temps. Le choix la loi d'écoulement de Prandtl Reuss impose que γ^e soit nul.

Expression indicielle du modèle

Déterminons tout d'abord les relations d'équivalence entre les deux écritures suivantes des lois comportement élasto-viscoplastiques dans le cas où l'écoulement plastique est décrit par la loi de Prandtl Reuss. Nous procéderons par identification. Les deux écritures sont les suivantes :

$$\dot{E} = \boldsymbol{S}^e : \dot{\Sigma} + \boldsymbol{M}^e : \Sigma \tag{3.1.5}$$

$$\dot{\Sigma} = \boldsymbol{C}^e : \left(\dot{E} - \dot{E}^{vp}\right) \tag{3.1.6}$$

Dans l'expression (3.1.6), le taux de déformation viscoplastique effectif est donné par :

$$\dot{E}^{\boldsymbol{vp}} = \frac{3}{2}\frac{\dot{E}^{vp}_{eq}}{\Sigma^e_{eq}}\Sigma^e_{dev} = \frac{3}{2}\frac{\dot{E}^{vp}_{eq}}{\Sigma^e_{eq}}\boldsymbol{K} : \Sigma^e \tag{3.1.7}$$

Au regard de l'expression (3.1.7) on remarque que seul les tenseurs des taux de déformations déviatorique ne sont constitués que d'une partie déviatorique. Ainsi le tenseur de viscosité s'écrit comme suit :

$$\boldsymbol{M}^e = (\frac{1}{2\eta^e}\boldsymbol{K}) \tag{3.1.8}$$

L'expression (3.1.5) peut s'écrire comme suit :

$$\dot{\Sigma} = \boldsymbol{C}^e\dot{E} - \boldsymbol{C}^e : \boldsymbol{M}^e : \Sigma \tag{3.1.9}$$

Par comparaison avec (3.1.6) on obtient l'égalité suivante :

$$\dot{E}^{vp} = \boldsymbol{M}^e : \Sigma \tag{3.1.10}$$

En égalisant les parties déviatoriques des expressions (3.1.10) et (3.1.7) on obtient :

$$\eta^e = \frac{1}{3}\frac{\Sigma^e}{\dot{E}^{vp}_{eq}} \tag{3.1.11}$$

L'expression ci-dessus est valide dans le cas des comportements globaux tout comme dans le cas des comportements locaux.

Nous présentons désormais le développement des relations de localisations données par :

$$\dot{\sigma}^r = \boldsymbol{C}^r : \boldsymbol{A}^{Ce} : \boldsymbol{S}^e : \dot{\Sigma} + \boldsymbol{C}^r : \boldsymbol{A}^{Ce} : (\boldsymbol{S}^E - I) : (\dot{\varepsilon}^{vpr} - \boldsymbol{A}^{Be} : \dot{E}^{vp})$$

Développons l'expression ci-dessus à l'aide des décomposition des tenseurs de quatrième ordre en la somme de leur partie déviatorique et hydrostatique:

$$\dot{\sigma} = (3k\boldsymbol{J} + 2\mu\boldsymbol{K}) : (N^{Ce}\boldsymbol{K} + M^{Ce}\boldsymbol{J}) : (\frac{1}{3k^e}\boldsymbol{J} + \frac{1}{2\mu^e}\boldsymbol{K}) : \dot{\Sigma} +$$
$$\boldsymbol{C}^r : \boldsymbol{A}^{Ce} : (\boldsymbol{S}^E - \boldsymbol{I}) : (\dot{\varepsilon}^{vpr} - \boldsymbol{A}^{Be} : \dot{E}^{vp})$$
$$\dot{\sigma} = (\frac{k}{k^e}M^{Ce}\boldsymbol{J} + \frac{\mu}{\mu^e}N^{Ce}\boldsymbol{K}) : \dot{\Sigma} +$$
$$(3k\boldsymbol{J} + 2\mu\boldsymbol{K}) : (N^{Ce}\boldsymbol{K} + M^{Ce}\boldsymbol{J}) : (\alpha\boldsymbol{J} + \beta\boldsymbol{K} - \boldsymbol{K} - \boldsymbol{J}) : (\dot{\varepsilon}^{vp} - A^{Be} : \dot{E}^{vp})$$
$$\dot{\sigma} = (\frac{k}{k^e}M^{Ce}\boldsymbol{J} + \frac{\mu}{\mu^e}N^{Ce}\boldsymbol{K}) : \dot{\Sigma} +$$
$$\left[(3k(\alpha - 1)M^{Ce}\boldsymbol{J} + 2\mu(\beta - 1)N^{Ce}\boldsymbol{K})\right] : (\dot{\varepsilon}^{vp} - (N^{Be}\boldsymbol{K} + M^{Be}\boldsymbol{J}) : \dot{E}^{vp})$$

On obtient l'expression suivante dans le cas incompressible:

$$\dot{\sigma}^r = \frac{\mu^r}{\mu^e}N^{Ce}\boldsymbol{K} : \dot{\Sigma} + 2\mu^r(\beta - 1)N^{Ce}\boldsymbol{K} : (\dot{\varepsilon}^{vpr} - N^{Be} : \dot{E}^{vp}) \tag{3.1.12}$$

Schéma numérique

Le schéma numérique utilisé dans ce chapitre est semblable à celui utilisé au chapitre précédent. L'unique différence réside dans le fait que les coefficients de viscosité doivent être calculé à chaque pas de temps de calculs. Initialement on donne des valeurs infinies aux coefficient de viscosité locaux et donc au coefficient de viscosité global.

Intégration analytique des lois de comportement

Dans cette section nous intégrons analytiquement les modèles d'écrouissage de Kocks et Mecking, de Estrin et Kocks et le modèle présenté ci-dessus. Nous supposons dans tous les développements suivants un taux de déformation plastique constant.

Modèle de Kocks et Mecking

Rappelons ici l'expression de la contrainte d'écoulement à zéro Kelvin :

$$\sigma_f = \alpha MGb\sqrt{\rho} \tag{3.1.13}$$

L'évolution de la densité de dislocation est donnée par :

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon^p} = M\left(k_1\sqrt{\rho} - k_2\rho\right) \tag{3.1.14}$$

Enfin l'écrouissage est décrit par une loi de type puissance :

$$\dot{\varepsilon}^p = \dot{\varepsilon}_0\left(\frac{\sigma}{\sigma_f}\right)^m \tag{3.1.15}$$

Nous essayons ici d'obtenir l'expression du taux d'écrouissage $\theta = \frac{d\sigma}{d\varepsilon^p}$. L'incrément de contrainte est défini par :

$$d\sigma = \frac{\partial\sigma}{\partial \ln\dot{\varepsilon}^p} d\ln\dot{\varepsilon}^p + \frac{\partial\sigma}{\partial\sigma_f} d\sigma_f \tag{3.1.16}$$

Développons alors l'expression ci-dessus :

$$d\sigma = \frac{\partial\sigma}{\partial\dot{\varepsilon}^p}\frac{\partial\dot{\varepsilon}^p}{\partial \ln\dot{\varepsilon}^p} d\ln\dot{\varepsilon}^p + \frac{\partial\sigma}{\partial\sigma_f} d\sigma_f \tag{3.1.17}$$

Or $\partial\sigma/\partial\dot{\varepsilon}^p$ peut être facilement évalué a partir de (3.1.15) :

$$\frac{\partial\sigma}{\partial\dot{\varepsilon}^p}=\frac{1}{m}\left(\frac{1}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m}\left(\dot{\varepsilon}^p\right)^{1/m-1} \tag{3.1.18}$$

Ainsi (3.1.17) devient :

$$d\sigma=\frac{1}{m}\left(\frac{1}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m}\left(\dot{\varepsilon}^p\right)^{1/m-1}\frac{\partial\dot{\varepsilon}^p}{\partial\ln\dot{\varepsilon}^p}d\ln\dot{\varepsilon}^p+\frac{\partial\sigma}{\partial\sigma_f}d\sigma_f=\frac{\sigma}{m}d\ln\dot{\varepsilon}^p+\frac{\partial\sigma}{\partial\sigma_f}d\sigma_f \tag{3.1.19}$$

Le taux d'écrouissage s'écrit donc comme suit :

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon^p}=\frac{\sigma}{m}\frac{d\ln\dot{\varepsilon}^p}{d\varepsilon^p}+\frac{\partial\sigma}{\partial\sigma_f}\frac{d\sigma_f}{d\varepsilon^p} \tag{3.1.20}$$

Dans le cas présent on suppose $\dot{\varepsilon}^p$ constant ainsi nous ne sommes intéressés que par la seconde partie du membre de droite de l'équation ci-dessus.

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon^p}=\theta=\frac{\partial\sigma}{\partial\sigma_f}\frac{d\sigma_f}{d\varepsilon^p} \tag{3.1.21}$$

Développons désormais l'expression ci-dessus :

$$\theta=\left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m}\frac{\partial\sigma_f}{\partial\rho}\frac{\partial\rho}{\partial\varepsilon^p}=\left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m}\frac{\alpha MGb}{2\sqrt{\rho}}\frac{\partial\rho}{\partial\varepsilon^p} \tag{3.1.22}$$

En intégrant l'expression (3.1.14) dans l'expression ci-dessus, on obtient :

$$\theta==\left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m}\frac{\alpha MGb}{2\sqrt{\rho}}M\left(k_1\sqrt{\rho}-k_2\rho\right) \tag{3.1.23}$$

En combinant (3.1.13) et (3.1.15) on obtient la relation suivante :

$$\sqrt{\rho} = \frac{\sigma}{\alpha MGb}\left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m} \tag{3.1.24}$$

Ainsi, on peut réécrire l'équation sous la forme suivante :

$$\theta = \theta_{II}\left(1 - \frac{\sigma}{\sigma_s}\right) \tag{3.1.25}$$

Où 'θ_{II}' et 'σ_s' représentent respectivement le taux d'écrouissage au début de l'étape II de l'écrouissage et la contrainte de saturation et sont donnés par :

$$\theta_{II} = \frac{1}{2}M^2\alpha Gbk_1\left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m} \tag{3.1.26}$$

et

$$\sigma_s = \alpha MGb\frac{k_1}{k_{20}}\left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m}\left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_*}\right)^{1/n} \tag{3.1.27}$$

Modèle de Estrin et Kocks

Précisons dans les équations définissant le modèle d'écrouissage proposé par Estrin et Kocks. La contrainte critique de glissement est donnée par (3.1.13). L'écoulement plastique est décrit par l'expression (3.1.15).

L'évolution de la densité de dislocation tiens compte de l'effet des joints de grains sur le stockage des dislocations et s'écrit comme suit :

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon^p} = M\left(\frac{k}{d} + k_1\sqrt{\rho} - k_2\rho\right) \tag{3.1.28}$$

L'intégration de ce modèle est très semblable à celle présentée précédemment. Ainsi nous commencerons le développement à partir de (3.1.22) que nous réécrirons ici pour des raisons de simplicité de lecture.

$$\theta = \left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m} \frac{\partial\sigma_f}{\partial\rho}\frac{\partial\rho}{\partial\varepsilon^p} = \left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m} \frac{\alpha MGb}{2\sqrt{\rho}}\frac{\partial\rho}{\partial\varepsilon^p}$$

Insérons l'évolution de la densité de dislocation dans l'expression ci-dessus.

$$\theta = \left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m} \frac{\partial\sigma_f}{\partial\rho}\frac{\partial\rho}{\partial\varepsilon^p} = \left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m} \frac{\alpha MGb}{2\sqrt{\rho}} M\left(\frac{k}{d} + k_1\sqrt{\rho} - k_2\rho\right) \tag{3.1.29}$$

En insérant (3.1.24) dans l'expression ci-dessus on obtient alors :

$$\theta = \frac{(\alpha MGb)^2}{2\sigma} M\left(\frac{k}{d} + k_1\frac{\sigma}{\alpha MGb}\left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{1/m} - \frac{k_2\sigma^2}{(\alpha MGb)^2}\left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{2/m}\right) \tag{3.1.30}$$

Après quelques calculs, l'équation ci-dessus peut être réécrite sous la forme suivante :

$$\theta = \frac{M}{\sigma}\frac{k_2}{2}\left(\sigma_s^h\right)^2\left[1 - \kappa + \kappa\frac{\sigma}{\sigma_s^h} - \left(\frac{\sigma}{\sigma_s^h}\right)^2\right]$$

Où la contrainte de saturation σ_s^h et le coefficient κ sont donnés par :

$$\sigma_s^h = \alpha MGb\frac{k_1}{k_2}\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}^{\frac{1}{m}}\kappa^{-1} \text{ et } \qquad \kappa = 2\left[1 + \left(1 + \frac{4kk_2}{dk_1^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^{-1}$$

Modèle C-C-Q

On reprend ici le même raisonnement que celui présenté ci-dessus. Après calcul on obtient :

$$\theta = \frac{Mk_2\sigma_s^2}{2\left[\sigma\left(\frac{\dot{\varepsilon}^p}{\dot{\varepsilon}_0}\right)^{-1/m} - \frac{\beta}{\sqrt{d}}\right]}\left[1-\left(\frac{\sigma}{\sigma_s}\right)^2 - 2\left(1-\frac{\sigma}{\sigma_s}\right)(1+Z)\left(1+Z+\left(1+\frac{4k_2k}{d}\right)^{\frac{1}{2}}\right)^{-1}\right]$$

Où la contrainte de saturation est donnée par:

$$\sigma_s = \frac{\alpha MGbk_1}{2k_2}\left(1+\frac{2\beta k_2}{\alpha MGbk_1\sqrt{d}}+\left(1+\frac{4k_2k}{dk_1^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right)$$

et :

$$\mathrm{Z} = \frac{2\beta k_2}{\alpha MGbk_1\sqrt{d}}$$

Références partielles

Berbenni, S., V. Favier, et al. (2004). "Micromechanical modeling of the elastic viscoplastic behavior of polycrystalline steels having different microstructures." Materials science and engineering **A372**: 128-136.

Bornert, M. (1996). Morphologie microstructurale et comportement mecanique; caracterisation expérimentales, approches par bornes estimations autocoherantes generalisees. Paris, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées.

Budiansky, B. and Wu (1962). "Theoretical prediction of plastic strains of polycrystals." Proceedings of the 4th U.S. National congress of applied mechanics, ASME: 1175.

Cherkaoui, M., Q. Sun, et al. (2000). "Micromechanics modeling of composite with ductile matrix and shape memory alloy reinforcement." International journal of solids and structures **37**: 1577-1594.

Eshelby, J. D. (1957). "The determination of an ellispoidal inclusion and related problems." Proceedings of the Royal Society of London **A241**: 376-396.

Hashin, Z. and S. Strikman (1963). "A variational approach to the theory of the elastic behavior of multiphase materials." Journal of the mechanics and physics of solids **11**: 127-140.

Hill, R. (1965). "Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals." Journal of the mechanics and physics of solids **13**: 89.

Kroner, E. (1961). "Zur plastichen verformung des vielkristalls." Acta metallurgica **9**: 155.

Masson, R. and A. Zaoui (1999). "Self consistent estimates for the rate dependent elastoplastic behaviour of polycrystalline materials." Journal of the mechanics and physics of solids **47**: 1543-1568.

Molinari, A., S. Ahzi, et al. (1997). "On the self consistent modeling of elastic plastic behavior of polycrystals." Mechanics of materials **26**: 43-62.

Mura, T. (1993). Micromechanics of defects in solids. Dordrecht/Boston/London, Kluwer academic publisher.

Weng, G. J. (1981). "A self consistent relation for the time dependent creep of polycrystals." Journal of apllied mechanics **48**: 41-46.