Nanomécanique des champs de défauts cristallins

Taupin Vincent

▶ **To cite this version:**

Taupin Vincent. Nanomécanique des champs de défauts cristallins. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Université de Lorraine; Ecole Doctorale C2MP, 2019. tel-02339226

HAL Id: tel-02339226
https://hal.univ-lorraine.fr/tel-02339226

Submitted on 30 Oct 2019

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.

Mémoire d'Habilitation à Diriger des Recherches

présenté par

Taupin Vincent

à :

l'Université de Lorraine

Spécialité : Mécanique et Matériaux

Nanomécanique des champs de défauts cristallins

Soutenance publique prévue le 16 Octobre 2019 devant le jury composé de :

Brigitte Bacroix, Directrice de Recherche CNRS, Université Paris XIII, Rapporteuse
Marc Fivel, Directeur de Recherche CNRS, Université de Grenoble Alpes, Rapporteur
Samuel Forest, Directeur de Recherche CNRS, Mines ParisTech, Rapporteur
Nabila Maloufi, Maître de Conférences HDR, Université de Lorraine, Examinatrice
Stéphane Berbenni, Directeur de Recherche CNRS, Université de Lorraine, Examinateur
Mikhail Lebedkin, Directeur de Recherche CNRS, Université de Lorraine, Examinateur
Laurent Capolungo, Research Scientist, Los Alamos National Laboratory, Examinateur
Claude Fressengeas, Professeur Emeritus, Université de Lorraine, Invité

Remerciements

Je tiens en premier lieu à remercier les membres de mon jury. Les rapporteurs, Brigitte Bacroix, Marc Fivel et Samuel Forest. Les examinateurs, Nabila Maloufi, Stéphane Berbenni, Laurent Capolungo, Mikhail Lebedkin et Claude Fressengeas. Je remercie aussi Stéphane Berbenni pour avoir accepté d'être mon parrain scientifique.

Les travaux de recherche présentés dans ce mémoire font suite à mon recrutement en section 9 du CNRS en 2010, en tant que chargé de recherches, et à mon affectation au LEM3, Laboratoire d'Etudes des Microstructures et de Mécanique des Matériaux. Ce laboratoire est né en 2011 de la fusion du LPMM, Laboratoire de Physique et Mécanique des Matériaux au sein duquel j'ai effectué ma thèse de doctorat de 2004 à 2007, et du LETAM, Laboratoire d'Étude des Textures et Applications aux Matériaux. Ce laboratoire est une Unité Mixte de Recherche sous la tutelle de l'Université de Lorraine, du CNRS et d'Arts et Métiers ParisTech. Je souhaite remercier les membres du laboratoire et les directeurs d'unité pour m'avoir bien accueilli durant cette période. Je tiens aussi à remercier les membres de l'Unité Mixte Internationale Georgia Tech Lorraine pour m'avoir accueilli plusieurs années en tant que chercheur invité, à travers une collaboration avec Laurent Capolungo.

Certains des travaux présentés font l'objet de projets de recherches financés par l'Agence Nationale de la Recherche, la Région Lorraine / Grand-Est, le centre de recherche de Constellium C-Tech, et le Laboratoire d'Excellence DAMAS, Design d'Alliages Métalliques pour l'Allégement des Structures, piloté par le laboratoire LEM3 et l'Institut Jean Lamour.

La recherche est un travail d'équipe. Les projets et les résultats sont le fruit de collaborations, de discussions et d'interactions avec des collègues internes et externes. Je tiens à remercier les personnes suivantes : Mikhail Lebedkin, Tatiana Lebedkina, Claude Fressengeas, Benoit Beausir, Emmanuel Bouzy, Thiebaud Richeton, Stéphane Berbenni, Pascal Ventura, Jean-Marc Raulot, Mohammad Jrad, Nabila Maloufi, Antoine Guitton, Olivier Bouaziz, Raphael Pesci, Sophie Berveiller, Juliette Chevy, Vladimir Gornakov, Sergei Bozhko, Nikolai Kobelev, Patrick Cordier, Xiaoyu Sun, Pierre Hirel, Philippe Carrez, Sylvie Demouchy, Armand Beaudoin, Russel McDonald, Peter Kurath, Christophe Denoual, Ronan Madec, Yves-Patrick

Pellegrini, Benoit Devincre, Ladislas Kubin, Paul Duval, François Louchet, Maurine Montagnat, Laurent Capolungo, Ricardo Lebensohn.

Il est important de remercier les doctorants, Kodjovi Gbémou et Konlam Sénam Djaka, que j'ai co-encadrés et qui, part leur travail de thèse de doctorat, ont contribué de façon importante aux résultats présentés. Il faut aussi remercier leurs directeurs de thèse respectifs Jean-Marc Raulot et Stéphane Berbenni. Des travaux présentés dans les perspectives s'inscrivent dans le cadre de la thèse de doctorat en cours de Clément Ernould, co-dirigée avec Emmanuel Bouzy et Benoit Beausir. Je tiens aussi à remercier les étudiants en postdoctorat Manas Upadhyay, Amit Kumar Das, Aurélien Villani et Satyapriya Gupta pour leur contribution.

Enfin, je tiens à remercier les personnes suivantes :

Claude Fressengeas, pour avoir été un excellent directeur de thèse et ensuite un collègue très proche (j'aimerais savoir le nombre de cafés et de discussions à la cafétéria), pour m'avoir donné goût à la recherche et pour m'avoir motivé et aidé à concourir avec succès au CNRS. Je t'en serai éternellement reconnaissant.

Mikhail Lebedkin, pour bien des raisons, notamment pour m'avoir intégré dans ta collaboration avec l'Académie des Sciences de Russie et permis d'effectuer deux séjours longs en Russie. Merci aussi pour toutes les discussions agréables lors des pauses café.

Stéphane Berbenni. J'apprécie beaucoup en plus de ta culture, de ton ouverture et de ta rigueur scientifiques la passion que tu transmets lorsqu'on discute, cela depuis mon postdoctorat avec toi. Je te remercie aussi pour tous les conseils donnés et pour toujours essayer de mettre en avant les jeunes au sein du laboratoire.

Laurent Capolungo. J'adore travailler avec toi depuis notre rencontre en 2010. En plus d'être devenu un ami transatlantique, tu es une source intarissable d'idées et plein de dynamisme, avec qui c'est un plaisir de discuter. Merci aussi pour m'avoir invité à plusieurs reprises à Los Alamos, cela a été à chaque fois une expérience riche et inoubliable.

Ma femme, Katia, pour ses encouragements et pour supporter mes absences (physiques et spirituelles), mes moments de stress et de fatigue. Je remercie aussi mes parents et beaux-parents pour leur motivation et leur soutien.

Résumé

Les travaux de recherche présentés dans ce mémoire concernent essentiellement le développement de modèles théoriques et de méthodes numériques pour l'étude à l'échelle nanométrique de la déformation plastique assistée par les dislocations et par les interfaces de type joints de grains. Les modèles de mécanique des milieux continus développés constituent des extensions d'une théorie de mécanique des champs de dislocations qui est rappelée dans un premier chapitre, avec des applications aux structures de coeur des dislocations et aux milieux piézoélectriques. Dans le deuxième chapitre, nous présentons un modèle élastoplastique de mécanique des champs de désinclinaisons et de dislocations. L'introduction des désinclinaisons dans un modèle d'ordre supérieur considérant les courbures élastiques et les moments de contrainte, permet de rendre compte des discontinuités de rotation, ce qui rend la théorie intéressante pour traiter les défauts de type joints de grains. Dans ce mémoire, nous présentons les études réalisées sur les structures de coeurs des joints de flexion, leurs champs élastiques et leurs mécanismes de plasticité, en particulier la migration sous contrainte appliquée. Bien que cette théorie soit utilisée à une échelle de résolution inférieure aux distances inter-atomiques, elle reste continue et permet de décrire l'évolution spatiale des courbures élastiques au niveau du coeur des défauts cristallins. Nous montrons aussi comment les équations de transport régissant l'évolution des densités de défauts permettent de prédire l'évolution des joints de grains et de la plasticité associée. Dans le troisième chapitre, nous présentons des méthodes spectrales développées dans le but de résoudre numériquement les équations de champs de la mécanique des champs de dislocations. Les méthodes proposées sont une alternative aux techniques éléments finis et consistent à résoudre les équations dans l'espace de Fourier. Le calcul des transformées de Fourier étant effectué à l'aide d'algorithmes rapides et les intégrales de convolution intervenant dans l'équilibre des contraintes devenant de simples produits dans l'espace de Fourier, ces méthodes spectrales sont numériquement très attractives. Il est important néanmoins de faire attention aux problèmes de stabilité et de précision numériques. Dans ce mémoire, nous présentons des méthodes développées pour résoudre de façon stable et précise les équations statiques de la mécanique des champs de dislocations. Ensuite, nous présentons une méthode spectrale dédiée à la résolution de l'équation de transport des densités de dislocations. Dans le quatrième et dernier chapitre, nous présentons une synthèse et des perspectives relatives à ces travaux de recherche.

Abstract

The research activities presented in this manuscript essentially concern the development of theoretical models and numerical methods for the investigation of plastic deformation mediated by dislocations and by interfaces, such as grain boundaries, at the nanometric scale. The proposed continuum mechanics models constitute extensions of a field dislocation mechanics theory that will be recalled in the first chapter, along with applications to dislocation core structures and to piezoelectric media. In the second chapter, we present an elastoplastic model of disclination and dislocation fields. The introduction of disclinations in a higher order model that considers elastic curvatures and couple stresses, allows rendering rotation discontinuities, which makes the theory appealing for studying grain boundary type defects. In this manuscript, we essentially present research conducted on the core structures and elastic fields of tilt grain boundaries, as well as interface mediated plasticity mechanisms, in particular shear coupled boundary migration. Although this model is used at an interatomic spatial resolution, it remains continuous and allows capturing the spatial evolution of elastic curvatures at the core of crystal defects. We also show how the transport equations that govern the evolution of defect densities allow predicting the evolution of grain boundaries and the associated plasticity. In the third chapter, we present spectral methods developed to numerically solve the equations of the field dislocation mechanics model. The proposed methods are an alternative to finite element techniques and consist in solving the equations in the Fourier space. Because the calculation of Fourier transforms uses fast algorithms and the convolution integrals involved in the balance of stresses become simple products in the Fourier space, these spectral approaches are numerically very attractive. It is however important to take care of numerical stability and accuracy issues. In this manuscript, we present methods developed for stable and accurate solutions of the static equations of the field dislocation mechanics model. We then present a spectral method devoted to the solution of the dislocation density transport equation. In the fourth and last chapter, we present a summary and perspectives related to these research activities.

Table des matières

Remerciements ii

Résumé iv

Abstract v

Table des matières vi

Introduction générale 1
- Contexte . . . 1
- Travaux présentés . . . 8

1 Mécanique des champs de dislocations 20
- 1.1 Equations de champs . . . 20
- 1.2 Couplage avec les milieux piézoélectriques . . . 28
- 1.3 Modélisation des coeurs de dislocations . . . 31

2 Mécanique des champs de désinclinaisons et de dislocations 37
- 2.1 Equations de champs . . . 37
- 2.2 Structure de coeur des joints de flexion . . . 45
- 2.3 Migration des joints de flexion sous cisaillement appliqué . . . 50
- 2.4 Elasticité non locale . . . 54

3 Méthodes numériques spectrales 60
- 3.1 Statique des champs de dislocations . . . 60
- 3.2 Résolution de l'équation de transport des densités de dislocations . . . 72
- 3.3 Implémentation dans un cadre élastoviscoplastique . . . 78

4 Synthèse et perspectives 80
- 4.1 Synthèse . . . 80
- 4.2 Désinclinaisons discrètes, désinclinaisons généralisées . . . 82
- 4.3 Modélisation champ de phase pour le maclage . . . 85
- 4.4 Synergie simulation/microscopie électronique . . . 86
- 4.5 Localisation dans les alliages d'aluminium . . . 87

Introduction générale

Contexte

Les métaux sont des matériaux cristallins dont la déformation plastique est en grande partie liée à la multiplication et au mouvement des dislocations. Les polycristaux sont des ensembles de grains, ou cristaux, avec des orientations cristallographiques différentes et reliés entre eux par des joints de grains. Les polycristaux sont très utilisés et développés dans le domaine industriel, où une attention particulière est portée sur leur déformabilité plastique et leur durcissement mécanique. Ce dernier est majoritairement dû aux joints de grains qui tendent à agir comme des barrières au mouvement des dislocations. Une propriété remarquable qui en découle est l'effet Hall-Petch [Hall,1951, Petch,1953]. Plus la taille de grain est réduite, plus le matériau est dur. Les progrès récents en science des matériaux ont permis le développement de nanocristaux monophasés et multiphasés dont la taille de grains, ou l'épaisseur de grains dans le cas de matériaux à structures laminées, peut être inférieure au dixième de micron et même atteindre quelques dizaines de nanomètres [Wang,2004, Beyerlein,2014, Wang,2011]. Parmi les procédés de fabrication de telles microstructures, on peut citer les méthodes SPD (severe plastic deformation) produisant des déformations plastiques importantes, comme par exemple l'ARB (accumulative roll bonding). Cependant, l'augmentation de la limite élastique et de la contrainte d'écoulement dans ces microstructures à plasticité confinée est souvent suivie d'une perte de ductilité [Wang,2004]. Il existe des procédés plus complexes d'élaboration, comme la PVD (physical vapor deposition), qui permettent d'obtenir des microstructures avec moins de défauts et qui sont à la fois plus résistantes et plus ductiles [Mara,2008, Wang,2002], mais le coût de fabrication et/ou la difficulté d'intégration à une échelle industrielle limitent pour le moment leur utilisation à des études fondamentales. Dans les polycristaux à grains fins où la déformation plastique au sein des grains est limitée, d'autres mécanismes de plasticité peuvent opérer pour relaxer les contraintes internes [Shan,2004]. En particulier, les interfaces de type joints de grains et joints de phase peuvent jouer un rôle fondamental et devenir les sources principales de déformation plastique. Comme exemple de mécanismes de plasticité assistés par les interfaces, nous pouvons citer la migration des joints de grains [Mompiou,2009, Gorkaya,2009, Gottstein,2010]. Les interactions des dislocations extrinsèques avec les interfaces (transmission, absorption,

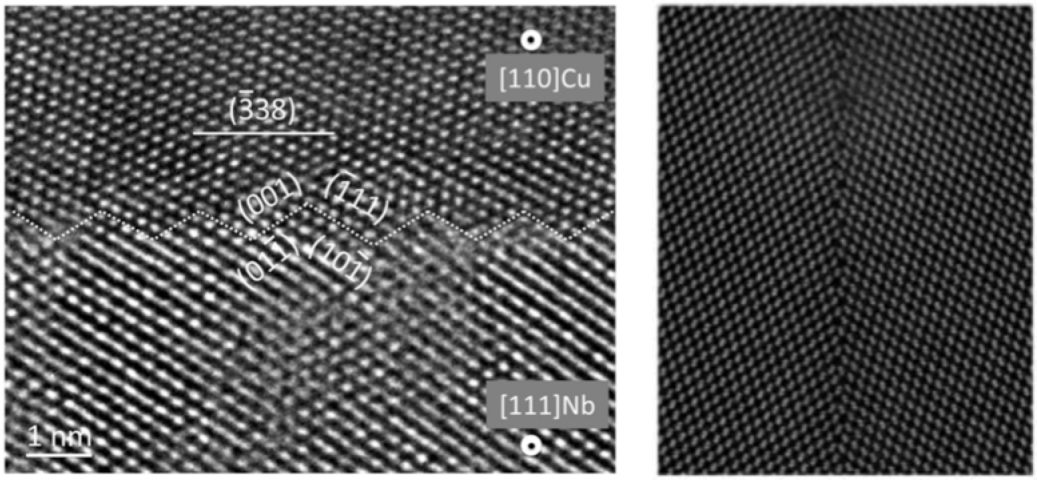


FIGURE 1 – A gauche : Image HR-TEM d'une hétéro-interface Cu-Nb dans une microstructure nano-multilaminée Cu/Nb produite par ARB [Beyerlein,2014]. A droite : Image HR-TEM d'un joint de flexion Σ9 dans Si [Couillard,2013].

décomposition, cisaillement, montée...) sont aussi très importantes [Priester,1997, Priester,2001, Priester,2013]. Ces interfaces contrôlent donc le durcissement mécanique et la ductilité des microstructures. Les lignes triples jouent également un rôle important [Bollman,1991, Rösner,2011]. L'étude et la compréhension de ces mécanismes alternatifs de plasticité et des interactions dislocations / interfaces sont sources de recherches fondamentales, du point de vue expérimental et théorique.

Parmi les approches théoriques existantes, les simulations atomistiques (dynamique moléculaire, statique moléculaire, nudged elastic band) ont été appliquées avec succès aux nanocristaux [Bitzek,2008, Warner,2006], et en particulier à l'étude des mécanismes élémentaires de plasticité assistés par les interfaces. Elles sont complémentaires aux observations expérimentales par microscopie à haute résolution et elles ont permis de comprendre des mécanismes tels que la migration et le glissement des joints de grains [Cahn,2006, Tucker,2010b, Farkas,2006], la nucléation et la propagation des disconnections [Hirth,1996, Hirth,2006, Pond,1994, Rajabzadeh,2013, Khater,2012], la nucléation et l'émission de dislocations par les joints de grains [Tschopp,2008a, Tucker,2010a, Van Swygenhoven,2006, Van Swygenhoven,2008], le grossissement ou le rétrécissement des grains par des effets de tension de surface, la rotation des grains [Trautt,2012, Barrales-Mora,2014, Barrales-Mora,2016], et l'absorption, la réorganisation et la transmission des dislocations extrinsèques au niveau des joints de grains et des joints de phases [Wang,2008, Heinisch,1998, Dewald,2007]. Beaucoup d'études fondamentales ont été réalisées sur les joints de grains spéciaux, comme celui montré sur la figure 1 à droite. Ce sont des objets modèles pour la recherche, bien qu'ils ne soient pas représentatifs de la majorité des joints de grains réels dans les matériaux (structures plus irrégulières, plus diffuses, par-

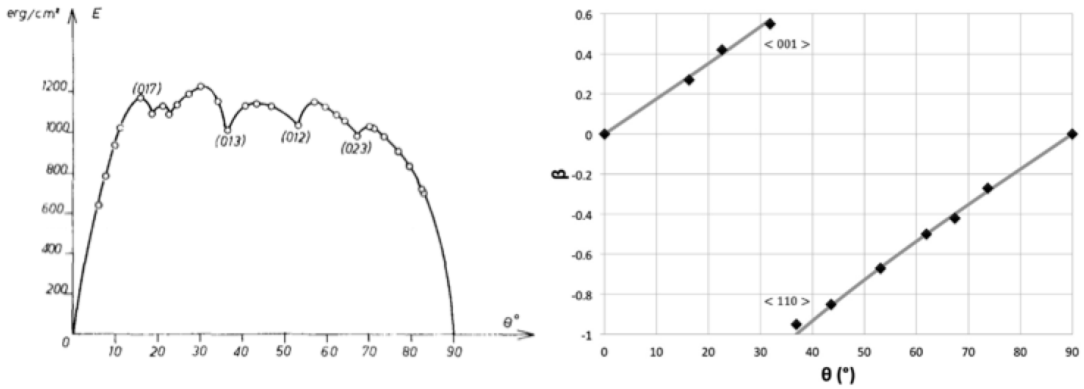


FIGURE 2 – A gauche : Energie d'excès en fonction de la désorientation pour des joints de flexion de type $< 100 >$ dans le cuivre [Hasson,1972]. A droite : shear-coupling factor β en fonction de la désorientation lors de la migration de joints de flexion de type $< 100 >$ dans l'aluminium [Gorkaya,2009].

fois amorphes, présence d'impuretés, de précipités, de solutés...). Pour ces joints de grains, en particulier pour les joints de flexion, il a été montré que les structures de coeur des joints de grains sont composées d'unités atomiques structurelles [Sutton,1983, Sutton,1995]. Nous pouvons voir des exemples de structures atomiques sur la figure 1, et d'unités structurelles sur la figure de droite. Un des résultats majeurs qui s'est dégagé de ces études fondamentales à l'échelle atomique est la dépendance du comportement des interfaces à leur structure atomique [Tucker,2010a, Tschopp,2007, Cahn,2006, Dewald,2007]. Par exemple, pour un même matériau, suivant la nature d'un joint de grain (orientation du plan, désorientation), la structure atomique est différente, et l'énergie et le comportement mécanique associés peuvent radicalement changer. L'énergie d'excès des joints de grains est ainsi très dépendante de la désorientation [Tschopp,2008a, Hasson,1972], tout comme la migration des joints de grains [Gorkaya,2009, Cahn,2006], comme le montre la figure 2. La structure atomique des joints de grains influe aussi sur leur capacité à émettre des dislocations et sur leur réponse élastique [Spearot,2005, Spearot,2007, Spearot,2008]. En ce qui concerne les dislocations, leur structure de coeur influe aussi sur leur comportement, en particulier sur la contrainte de Peierls, la contrainte nécessaire pour activer leur glissement dans le réseau cristallin. Cela est particulièrement important dans les métaux à structures cubiques centrées où la contrainte de Peierls est élevée en raison de l'étalement multi-planaire des coeurs de dislocations [Denoual,2007, Kubin,2013]. Les structures de coeur de dislocations partielles ont aussi un impact sur le glissement dévié [Kubin,2013]. Dans les travaux pionniers de Peierls et Nabarro, il a été montré que l'étalement du vecteur de burgers, représenté par une densité surfacique de dislocation continue, est en équilibre sous l'action de son propre champ de contrainte de cisaillement et d'une force de rappel du cristal [Peierls,1940, Nabarro,1947]. La contrainte de Peierls dépend de l'étalement du coeur. Depuis, de nombreux modèles plus élaborés, notamment des modèles de type

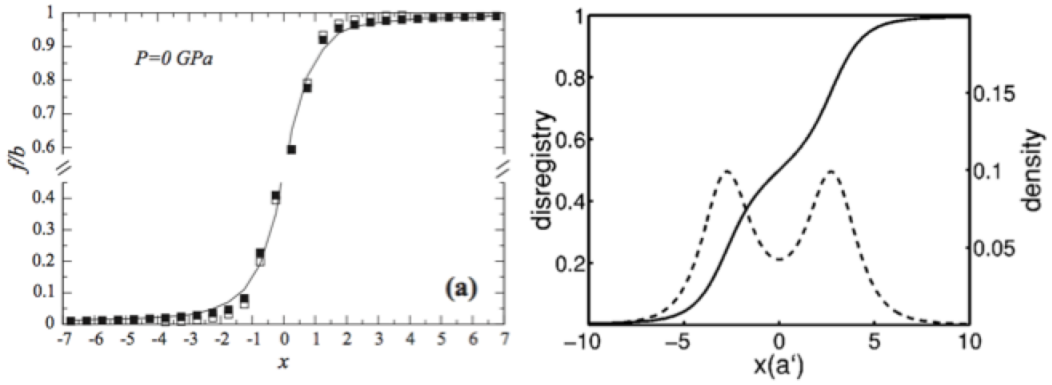


FIGURE 3 – A gauche : Comparaison d'un modèle de type Peierls-Nabarro avec les simulations atomistiques pour l'étalement planaire d'un coeur de dislocation vis dans MgO [Carrez,2015]. A droite : Dissociation d'un coeur planaire de dislocation coin en partielles de Shockley dans Al, à l'aide d'introduction de gamma-surfaces dans le modèle de Peierls-Nabarro [Hartford,1998].

champs de phases [Rodney,2003, Denoual,2004, Denoual,2007, Shen,2004], peuvent introduire des énergies de faute d'empilement généralisées obtenues à partir de simulations atomistiques. Des exemples sont montrés sur la figure 3. Ce genre de modèle peut rendre compte de la force de rappel pour de nombreux matériaux, prédire des structures de coeur dissociées et des contraintes de Peierls réalistes [Carrez,2015, Ferré,2007, Gouriet,2014, Hartford,1998, Joós,1994, Koslowski,2002, Kraych,2016, Lu,2000, Metsue,2010, Schoeck,2012, Zeng,2016].

Concernant la modélisation de la structure des joints de grains et des joints de phases, les modèles pionniers ont été développés par Frank, Bilby et Bollmann [Frank,1950, Bilby,1955, Bollman,1970]. Frank et Bilby ont montré qu'il est possible de définir une densité surfacique de dislocations capable d'accommoder n'importe quelle incompatibilité de transformation élastique entre deux cristaux au travers de l'interface. Dans le cadre des joints de flexion, il est possible d'exprimer la densité surfacique de dislocation coin nécessaire pour accommoder le changement de rotation au passage du joint de grain. C'est le modèle de Frank [Frank,1950]. Ce modèle a ensuite été repris par Read et Schockley [Read,1950]. La densité surfacique de dislocation coin a été exprimée de façon équivalente en termes de lignes de dislocations coins discrètes, dont l'espacement diminue avec la désorientation. Limité aux faibles désorientations pour lesquelles l'espacement entre dislocations reste réaliste, le modèle permet de relier l'énergie d'excès des joints de grains à la désorientation. Ce modèle a été récemment amélioré et étendu à des joints de grains plus généraux, en exprimant le contenu en vecteur de Burgers des interfaces en fonction des structures des interfaces obtenues par simulations atomistiques [Beers,2015]. Des résultats sont montrés sur la figure 4. Le modèle de Frank et Bilby a aussi été étendu et appliqué

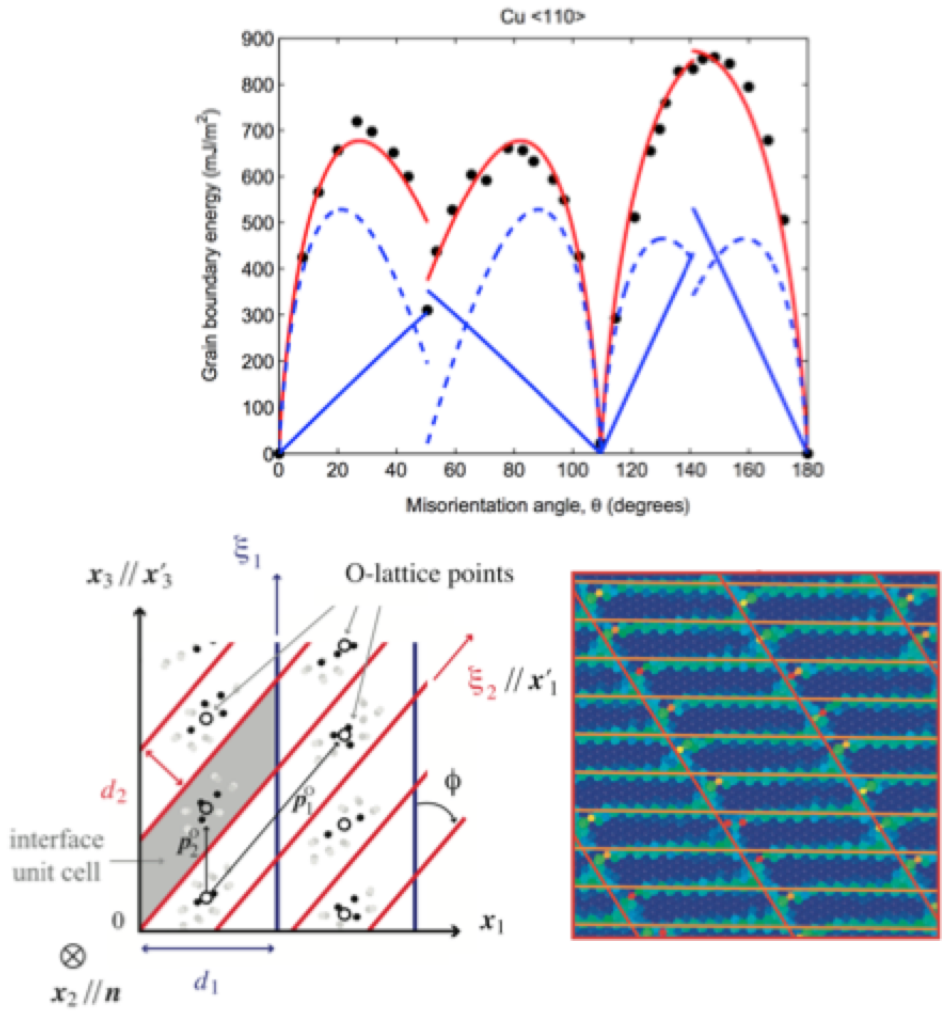


FIGURE 4 – En haut : prédiction de l'énergie d'excès des joints de grains, d'après un modèle de type Frank-Bilby et Read-Shockley basé sur les simulations atomistiques [Beers,2015]. En bas à gauche : Illustration de l'agencement des réseaux de dislocations vis dans les interfaces de type Cu/Nb à partir du O-lattice de Bollmann [Vattré,2013]. En bas à droite : comparaison des réseaux de dislocations vis prédits avec les simulations atomistiques [Vattré,2015].

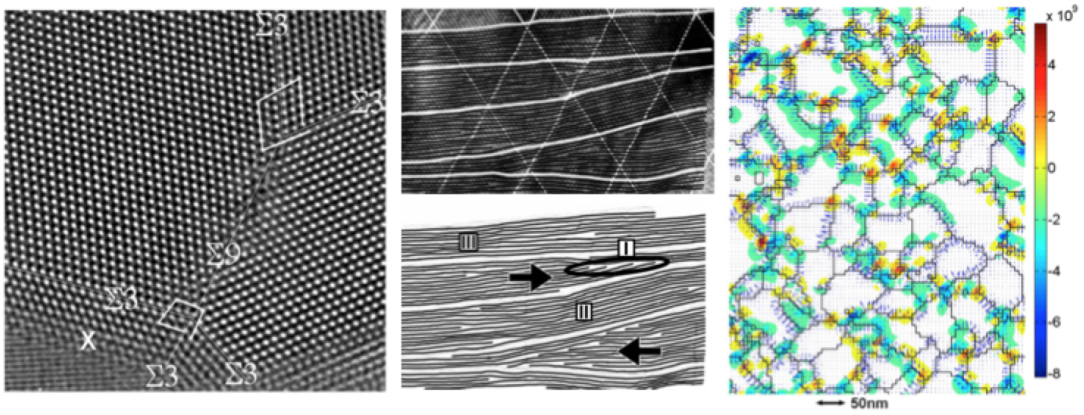


FIGURE 5 – A gauche : Observation par microscopie électronique à haute résolution d'une ligne de désinclinaison coin au niveau d'un noeud quadruple dans un nanocrystal de Pd [Rösner,2011]. Au milieu : Observation par microscopie électronique à haute résolution et identification de désinclinaisons coins dans du fer [Murayama,2002]. A droite : Estimation de densités de désinclinaison coin à partir d'une carte d'orientation obtenue par EBSD dans un polycristal d'Al à grains fins [Beausir,2013].

avec succès à la migration des joints de flexion dans un cadre micromécanique à champs moyens [Berbenni,2013]. La contribution majeure de Bollmann est la définition du O-lattice [Bollman,1970]. Ce réseau interfacial contient un ensemble de points O, qui définissent des zones de bonne coïncidence entre deux cristaux, et sont séparés par des régions de mauvaise coïncidence. C'est une généralisation du concept de CSL (coïncidence site lattice). La construction du O-lattice permet de définir des réseaux de lignes de dislocations, qui passent entre les points O et qui ont un vecteur de Burgers de l'un des cristaux [Knowles,1982, Yang,2009]. Il est également possible de définir un réseau secondaire, dit O2-lattice, qui permet de définir des réseaux de dislocations secondaires. Ces dernières peuvent être vues comme des perturbations du réseau primaire. Récemment, un modèle basé sur l'utilisation du O-lattice et de l'équation de Frank-Bilby discrétisée a été développé et permet de prédire les réseaux de dislocations interfaciales dans les matériaux biphasés de type Cu/Nb, en très bon accord avec les simulations atomistiques [Vattré,2013, Vattré,2014, Vattré,2015]. Des résultats sont montrés sur la figure 4.

Bien que prédictifs, les modèles de dislocations peuvent être contestés lorsque les désorientations entre grains (ou incompatibilités entre phases) deviennent importantes car l'espacement nécessaire entre les lignes de dislocations devient trop faible de sorte que les coeurs de dislocations se chevauchent. Dans le cadre des joints de flexion par exemple, les observations au microscope à haute résolution montrent qu'il devient impossible de discerner les coeurs de dislocations lorsque la désorientation devient trop grande [Priester,2013]. Le concept de désinclinaisons a été utilisé

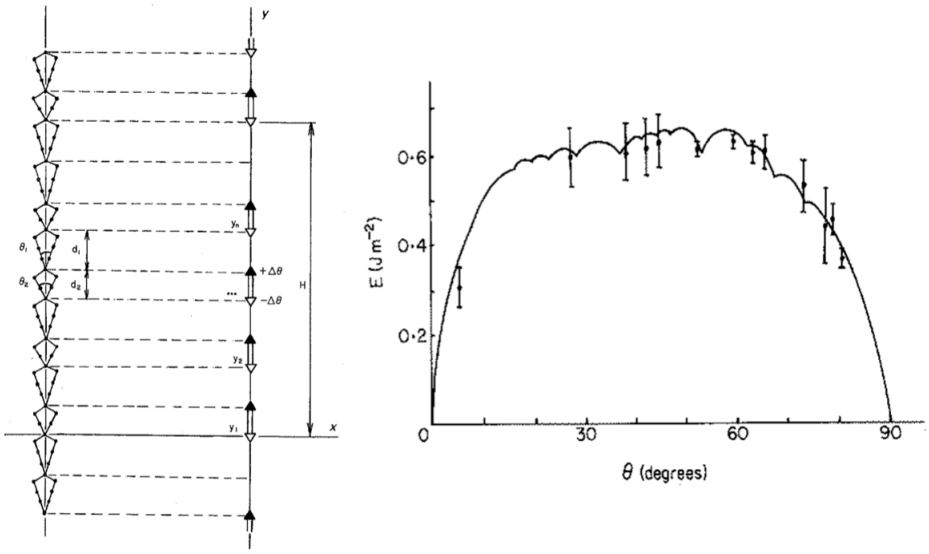


FIGURE 6 – Illustration du modèle DSUM [Gertsman,1989]. Les unités structurelles qui composent les joints de flexion sont modélisées par des dipôles de désinclinaisons coins.

pour proposer une meilleure description des joints de grains, notamment pour les fortes désorientations [deWit,1970, deWit,1973, Li,1972, Romanov,1992, Shih,1975]. Tout comme les joints de grains, les désinclinaisons sont des défauts de rotation du cristal. Ce sont des défauts de ligne, comme les dislocations, mais elles introduisent une discontinuité de la rotation élastique (ou plastique, au signe près) au sein du cristal. Ces défauts ont longtemps été négligés par rapport aux dislocations, car l'énergie d'une ligne de désinclinaison diverge en s'éloignant de la ligne, donnant des énergies infinies et donc irréalistes. Cependant, il a été plus récemment montré que ces défauts peuvent exister sous forme de configurations auto-écrantées, comme des dipôles ou des quadripôles [Romanov,1992, Romanov,2009]. Les désinclinaisons ont d'ailleurs été reportées dans différents métaux, à une échelle fine [Rösner,2011, Murayama,2002] et à l'échelle mésoscopique [Beausir,2013], comme le montre la figure 5. Dans le cadre des joints de flexion, les désinclinaisons ont alors été proposées comme une meilleure alternative pour la modélisation de la structure de coeur des joints de grains et de leur énergie [Li,1972, Bachurin,2003]. Le modèle DSUM (Disclination Structural Unit Model, voir figure 6) représente les unités structurelles atomiques qui composent les joints de grains [Sutton,1983, Sutton,1995] à l'aide de dipôles de désinclinaisons coins, et permet de retrouver l'évolution complexe de l'énergie des joints de flexion en fonction de la désorientation, en bon accord avec les données expérimentales [Hasson,1972]. Dans ce modèle, les désinclinaisons agissent comme un réseau secondaire de dislocations qui permet de faire varier la désorientation autour de joints de grains de référence. Le modèle DSUM a été récemment étendu pour caractériser l'énergie des noeuds triples [Upadhyay,2011].

Travaux présentés

Durant ma thèse de doctorat, nous avons étudié une théorie de mécanique des champs de dislocations. Baptisée Field Dislocation Mechanics (FDM) [Acharya,2001], elle repose sur le tenseur densité de dislocation de Nye, l'équation d'incompatibilité de Kröner et l'équation de transport des densités de dislocations de Mura [Kröner,1980, Mura,1963, Nye,1953]. Cette modélisation représente les lignes de dislocations de façon continue, au travers d'une distribution du tenseur de Nye. Ce tenseur, appelé plus couramment tenseur des densités de dislocations géométriquement nécessaires, est utilisé dans beaucoup de modèles, notamment pour introduire des échelles de longueur internes et obtenir des effets de taille de grain sur le durcissement mécanique par exemple, ou pour prendre en compte la réponse mécanique et l'évolution du contenu en dislocations des joints de grains [Gupta2018, Admal,2018]. Des composantes du tenseur peuvent même être estimées expérimentalement à partir de cartes d'orientations obtenues par EBSD comme le montre la figure 7 par exemple [Pantleon,2008, Beausir,2013, Cordier,2014, Ben-Saada,2017]. Ce tenseur est une mesure continue du vecteur de Burgers net d'un ensemble de dislocations coupant une surface délimitée par un circuit de Burgers. Le tenseur de Nye est à opposer aux densités de dislocations statistiquement distribuées pour lesquelles le vecteur de Burgers net est nul par compensation statistique. Le tenseur de Nye est par définition une grandeur multiéchelle qui dépend de l'échelle de résolution spatiale choisie. Pour une grande échelle de résolution, il permet de rendre compte de l'arrangement collectif des dislocations sous formes de structures mésoscopiques polarisées. C'est typiquement le cas des densités de dislocations accumulées aux joints de grains ou formant des sous-joints de grains, montrées sur la figure 7. A une échelle de résolution spatiale très fine, possiblement inférieure aux distances interatomiques, le tenseur de Nye permet de caractériser des dislocations individuelles et de façon continue les structures de coeur des dislocations [Gbemou,2016, Zhang,2015]. La figure 8 montre par exemple des distributions spatiales de composantes vis et coin du tenseur de Nye formant la structure de coeur d'une dislocation vis dans le cuivre, simulée par dynamique moléculaire [Hartley,2005]. Il est remarquable qu'au travers des différentes composantes vis et coin du tenseur de Nye, il est possible de caractériser la dissociation de la dislocation en partielles de Shockley.

La mécanique des champs de dislocations est fondée sur deux équations fondamentales. La première est l'équation d'incompatibilité, qui relie la partie incompatible du tenseur des distorsions élastiques au tenseur densité de dislocation de Nye au travers de l'opérateur rotationnel. Comme nous le verrons dans le premier chapitre, en se donnant une distribution spatiale de densité de dislocation, il est possible de dériver les déformations élastiques et les champs de contraintes internes associés. La figure 9 montre par exemple l'un des champs de contraintes de cisaillement hors plan associés à une densité de dislocation vis représentant une ligne de dislocation vis rectiligne infinie [Berbenni,2014]. La deuxième équation fondamentale est l'équa-

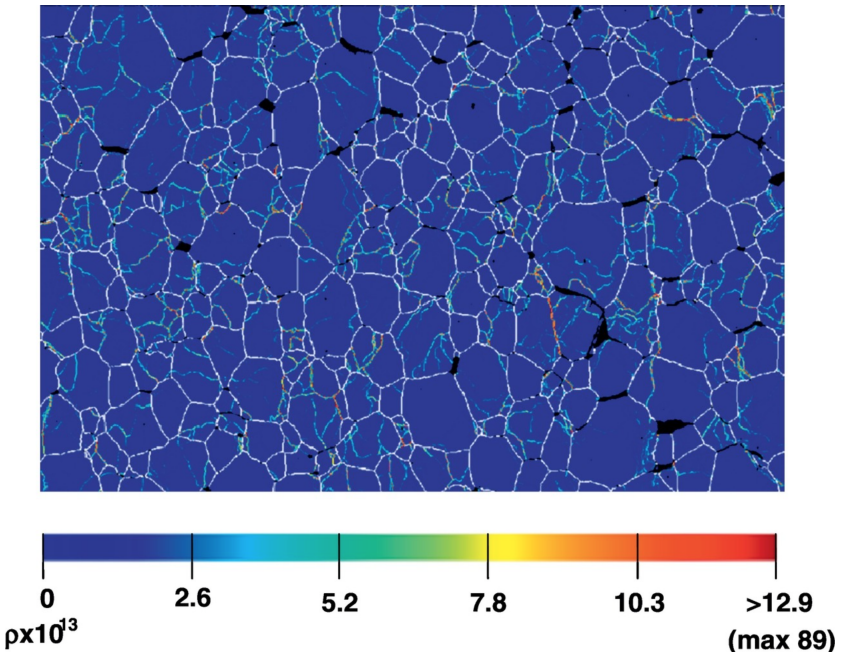


FIGURE 7 – Norme du tenseur densité de dislocation obtenue à partir des cartes d'orientations EBSD dans de l'uranium, permettant de mettre en évidence des sous-joints de grains [Ben-Saada,2017].

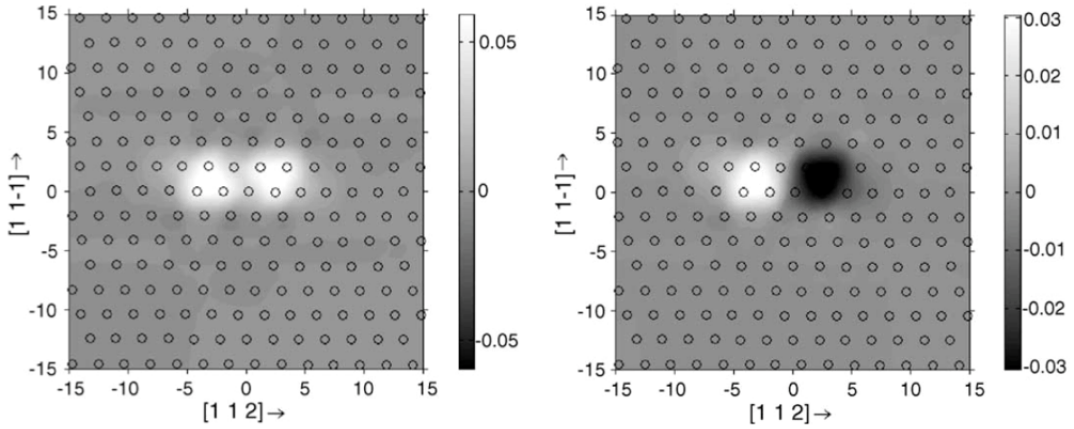


FIGURE 8 – Composantes vis (à gauche) et coin (à droite) du tenseur de Nye, formant la structure de coeur d'une dislocation vis dissociée en partielles de Shockley dans le cuivre, et dérivées à partir des déplacements atomiques obtenus par dynamique moléculaire [Hartley,2005].

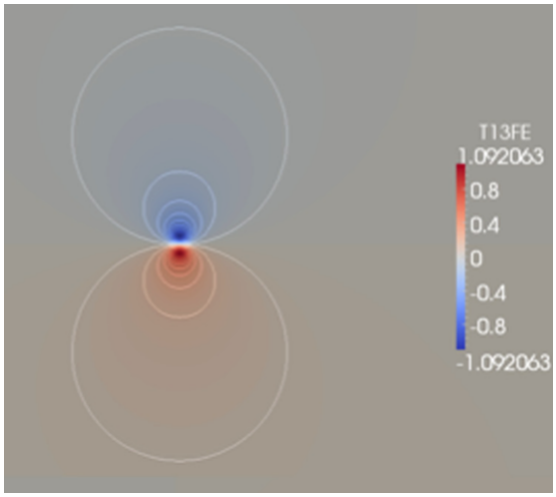


FIGURE 9 – Champ de contrainte de cisaillement hors plan associé à une densité de dislocation vis représentant une ligne de dislocation vis rectiligne infinie [Berbenni,2014].

tion de transport, qui régit l'évolution spatiotemporelle des densités de dislocations. C'est une équation hyperbolique, qui traduit la conservation du vecteur de Burgers au travers de surfaces élémentaires. Elle fait intervenir le vecteur vitesse des densités de dislocations, lui même faisant intervenir des forces motrices de Peach-Koehler. A une échelle mésoscopique, cette équation inclue un terme de source/puits supplémentaire lié à la plasticité par les densités de dislocations statistiques, et permet de rendre compte du mouvement collectif des dislocations, pour former des structures polarisées comme des empilements de dislocations à des interfaces impénétrables [Taupin,2012]. La figure 10 montre des exemples d'empilements de dislocations dans une structure à canaux [Taupin,2012], et dans un cylindre de glace déformé en torsion [Taupin,2007]. A une échelle très fine, l'équation de transport permet de simuler des mécanismes élémentaires tels que l'activation d'une source de Frank-Read [Varadhan,2006], comme le montre la figure 11.

Dans le premier chapitre, nous rappelons d'abord les équations fondamentales de la mécanique des champs de dislocations [Acharya,2001]. Comme première application, nous proposons un couplage de la mécanique des champs de dislocations avec les équations de champs de la piézoélectricité [Taupin,2014a]. Avec un tel modèle, nous pouvons étudier les effets de dislocations sur les propriétés piézoélectriques et réciproquement, l'action de champs électriques sur le mouvement des dislocations. Ces travaux entrent dans le cadre d'une collaboration avec l'Institut de Physique des Solides, de l'Académie des Sciences de Russie (V. Gornakov), et constituent une première étape de modélisation visant à terme un couplage de la mécanique des champs de dislocations avec les équations du micromagnétisme, en vue d'étudier les effets des dislocations sur la dynamique de la magnétisation dans les matériaux ferro-

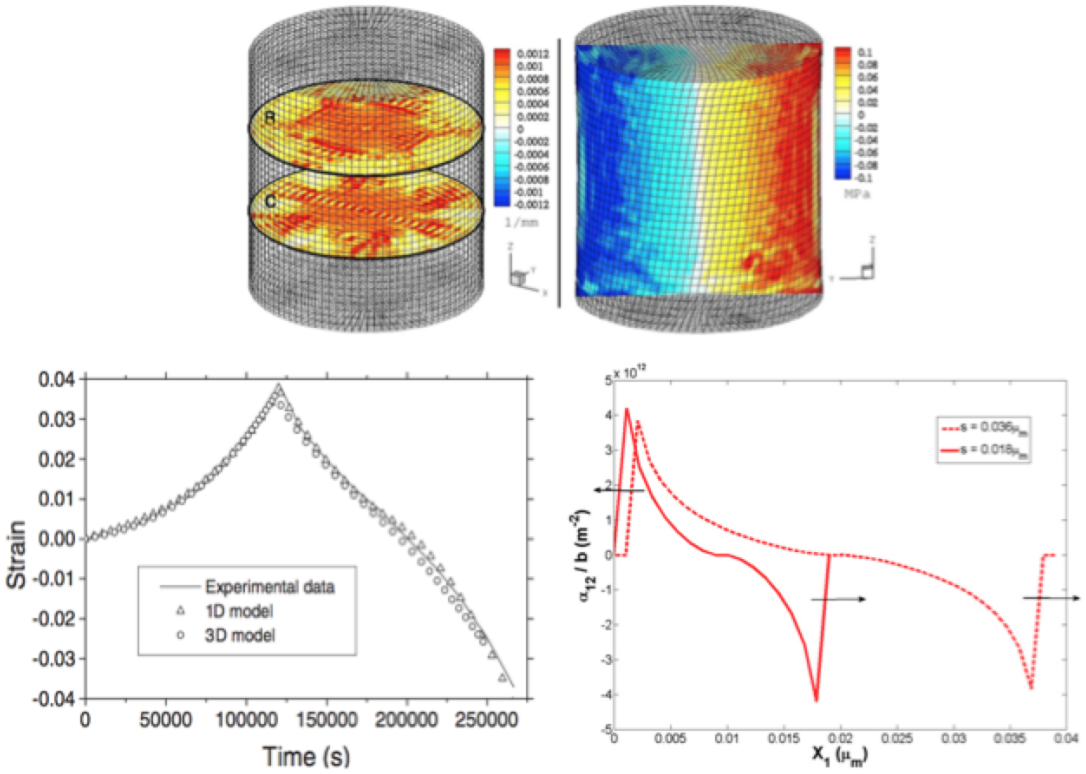


FIGURE 10 – En haut et en bas à gauche : distribution des densités de dislocations géométriquement nécessaires et de contrainte de cisaillement dans un cylindre de glace déformé en torsion, et courbe de fluage en torsion directe puis inverse [Taupin,2007]. En bas à droite : densités de dislocation coin dans des structures à canaux pour deux tailles de canal. Ces densités représentent la formation d'empilements de dislocations coins aux interfaces impénétrables. Les flèches montrent l'orientation du vecteur vitesse des dislocations [Taupin,2012].

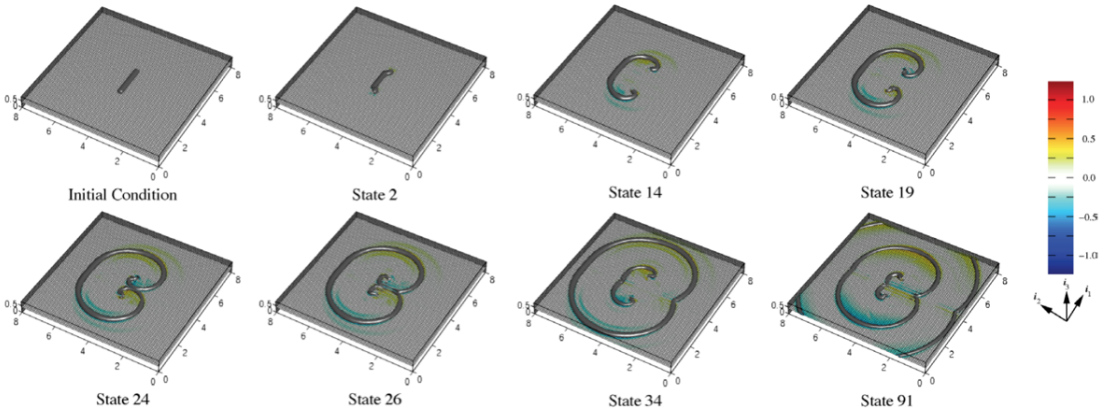


FIGURE 11 – Simulation d'une source de Frank Read à l'aide de l'équation de transport des densités de dislocations [Varadhan,2006].

magnétiques. Comme deuxième application, nous revisitons le problème de Peierls Nabarro [Peierls,1940, Nabarro,1947] avec l'équation de transport des densités de dislocations [Gbemou,2016]. Le modèle de Peierls Nabarro décrit la structure de coeur de dislocations planaires à l'aide d'une densité continue de dislocation, qui est en équilibre sous les actions opposées du champ de contrainte de cisaillement interne induit par la dislocation et de la résistance du cristal au cisaillement. Dans cette partie, nous montrons qu'il est possible d'introduire la résistance du cristal dans la mécanique des champs de dislocations à l'aide d'un potential de Peierls, et de prédire des structures de coeur en équilibre en résolvant l'équation de transport. Nous montrons aussi qu'il est possible d'introduire des énergies de faute d'empilement généralisées pour prédire des structures de coeur dissociées. Ces travaux font l'objet de la thèse de Kodjovi Gbémou. Dans les perspectives de ce mémoire, une application de la mécanique des champs de dislocations à l'échelle mésoscopique concerne l'étude des phénomènes de localisation de la déformation plastique dans les alliages aéronautiques AlCuLiMg [Taupin,2016]. Les travaux présentés et envisagés s'inscrivent dans le cadre d'une collaboration avec le centre de recherche de Constellium à Voreppe (Juliette Chevy) et l'Université d'Illinois (Armand J. Beaudoin). La majorité des résultats présentés ont été obtenus dans le cadre du postdoctorat de Satyapriya Gupta financé par Constellium, le labex DAMAS et la région Grand-Est.

Le deuxième chapitre est consacré à la mécanique des champs de désinclinaisons et de dislocations [Fressengeas,2011, Fressengeas,2014, Taupin,2014b, Taupin,2017]. Le concept de désinclinaison est illustré sur la figure 12. Les désinclinaisons sont comme les dislocations des défauts de ligne. Cependant, au lieu d'introduire une discontinuité du déplacement élastique, le vecteur de Burgers, elles introduisent une discontinuité de la rotation élastique, le vecteur de Frank. Le concept des désinclinaisons est utilisé dans divers domaines, par exemple dans les cristaux liquides et les matériaux antiferromagnétiques. Dans les matériaux cristallins comme les métaux, alliages, géomatériaux, le concept des désinclinaisons est utilisé pour représenter les incompatibilités de rotation aux jonctions de joints de grains [Bollman,1991, Rösner,2011], aux pointes de bandes de cisaillement [Romanov,2009], aux jonctions de facettes et de joints de macles [Romanov,2009, Barrett,2014]. La figure 13 est un remarquable exemple de mise en évidence expérimentale d'une ligne de désinclinaison au niveau d'une ligne quadruple [Rösner,2011]. Dans cette étude, la méthode Geometric Phase Analysis est appliquée à une image de microscopie électronique à haute résolution où il est possible de voir les atomes de palladium, des joints de flexion ainsi que deux lignes triple et quadruple. En traçant le profil de la rotation élastique de flexion le long du joint de flexion reliant la ligne triple à la ligne quadruple, il est possible de mettre en évidence un saut de la rotation élastique au passage de la ligne quadruple. C'est la signature d'une ligne de désinclinaison coin.

La figure 14 montre maintenant une image de microscopie à haute résolution dans du fer [Murayama,2002], où les auteurs utilisent la construction d'un dipôle de

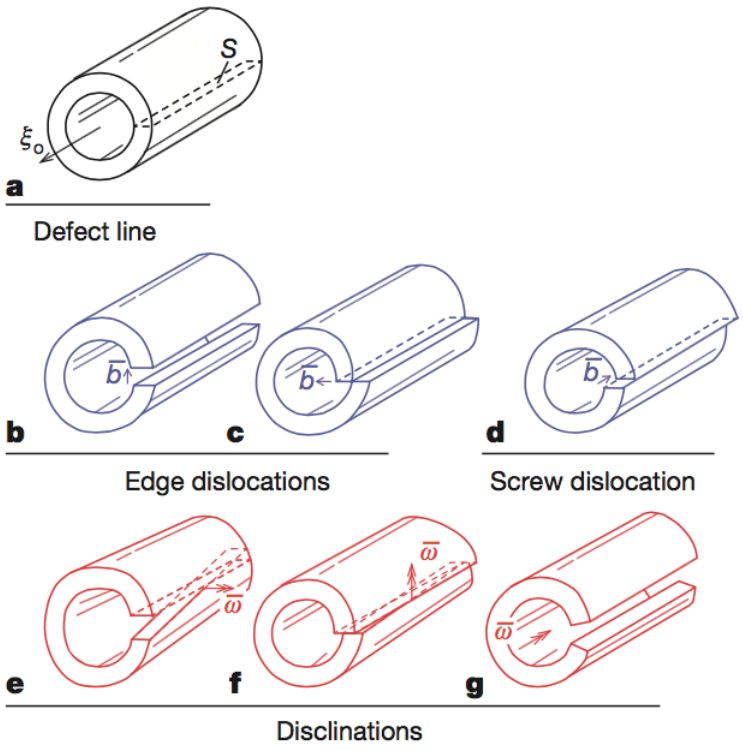


FIGURE 12 – Illustration des lignes de dislocations et de désinclinaisons selon le concept de Volterra [Volterra,1907]. Image extraite de [Cordier,2014].

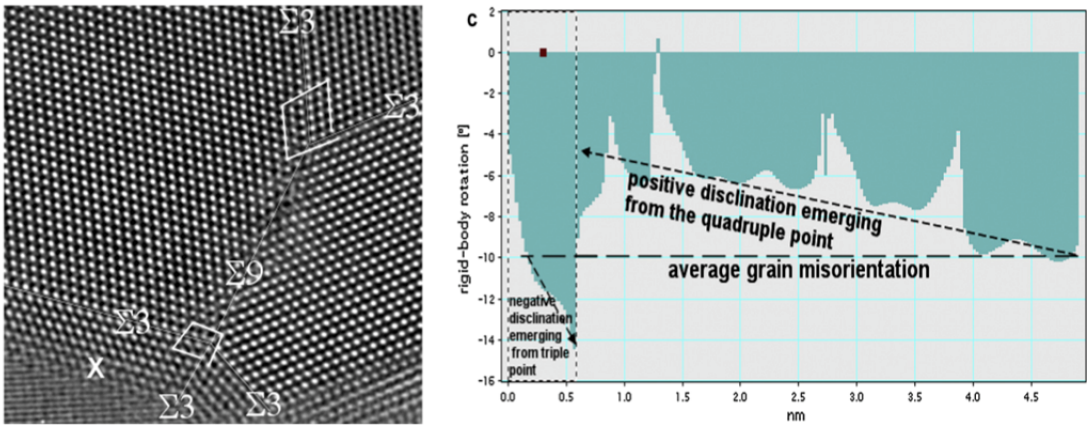


FIGURE 13 – Mise en évidence d'un saut de rotation élastique au niveau d'une ligne quadruple dans du palladium en applicant la méthode Geometric Phase Analysis à une image de microscopie électronique à haute résolution [Rösner,2011].

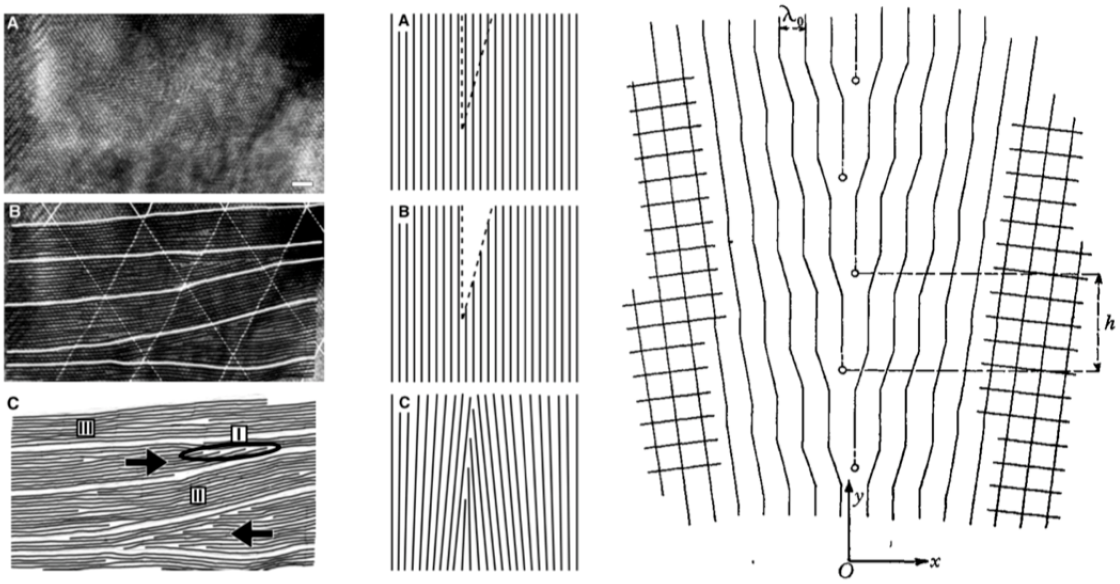


FIGURE 14 – Identification d'un dipôle de désinclinaisons coins dans du fer par microscopie électronique à haute résolution [Murayama,2002], et construction d'un joint de flexion à l'aide d'un mur de dislocations [Burgers,1940]. Colonne de gauche : image de microscopie et identification de plans cristallins. Colonne du milieu : illustration d'un dipôle de désinclinaisons coins pour expliquer les défauts observés au microscope. A droite : construction d'un joint de flexion à l'aide d'un mur de dislocations coins [Burgers,1940].

désinclinaisons coins pour expliquer l'observation de deux défauts cristallins (flèches noires) qui ressemblent fortement à deux joints de flexion opposés et de tailles finies, produisant une rotation visible des plans cristallins entre les deux parois. Cette figure est intéressante car elle nous renvoie à une question fondamentale et toujours ouverte concernant les joints de grains, en particulier les joints de flexion. Les défauts cristallins constituant les joints de grains doivent-ils être décrits par des désinclinaisons ou par des dislocations ? En effet, les parois de flexion observées sur la figure 14 correspondent exactement au schéma proposé en 1940 par Burgers pour construire un joint de flexion (nommé à l'époque surface de transition entre deux domaines) à l'aide d'un mur de dislocations coins [Burgers,1940]. Cette question se pose d'autant plus que les champs de contraintes générés par un mur de dislocations coins sont équivalents (ou au moins très proches) à ceux d'un dipôle de désinclinaisons coins [Romanov,1992]. La contestabilité du modèle de Read et Shockley [Read,1950] pour les fortes désorientations, liée au rapprochement excessif des coeurs de dislocations voisines, suggère qu'une description des joints de grains en termes de désinclinaisons est plus appropriée [Li,1972, Shih,1975]. Un modèle de désinclinaisons a d'ailleurs été proposé et appliqué avec succès pour prédire les énergies de joints de flexion pour toutes les désorientations [Gertsman,1989]. Il est donc intéressant de façon plus générale de voir ce qu'une modélisation des interfaces en termes de désinclinaisons peut apporter par rapport à une modélisation en termes de dislocations.

Dans la première partie du deuxième chapitre, la théorie de mécanique des champs de désinclinaisons est présentée [Fressengeas,2011]. Elle repose sur les travaux pionniers de deWit, qui a formulé l'aspect statique [deWit,1970, deWit,1973]. En partant de la mécanique des champs de dislocations, les densités de désinclinaisons sont ajoutées, auxquelles sont associées des courbures élastiques et des moments de contrainte, ce qui rend le modèle assez proche des modèles de type Cosserat [Cosserat,1909]. La nouveauté majeure du modèle proposé est l'équation de transport des désinclinaisons, qui fournit leur dynamique en fonction des moments de contrainte et qui contient un terme de source/puits de dislocations : le mouvement des désinclinaisons permet la nucléation (ou l'annihilation) des dislocations. En imaginant un joint de grain modélisé en termes de désinclinaisons, nous pouvons imaginer la nucléation de dislocations par les joints de grains [Spearot,2007]. Dans la suite du chapitre, nous présentons des applications, dont le but est de valider cette nouvelle théorie et de tester son potentiel en termes de prédiction de la structure de coeur des joints de grains [Taupin,2013, Fressengeas,2014, Taupin,2017, Sun,2016], puis de leurs mécanismes de plasticité. Nous nous intéressons en particulier à la migration des joints de flexion sous cisaillement appliqué [Cordier,2014, Taupin,2014b], mécanisme déjà étudié dans la littérature [Berbenni,2013, Cahn,2006, Mompiou,2009]. Ces travaux représentent la majorité de mes activités de recherche depuis mon recrutement au CNRS en 2010. Ils ont été effectués en étroite collaboration avec Claude Fressengeas au LEM3 et Laurent Capolungo à Georgia Tech Lorraine (maintenant à Los Alamos National Laboratory). La majorité des résultats présentés a été obtenue dans le cadre de la thèse de Manas Upadhyay à Georgia Tech Lorraine sous

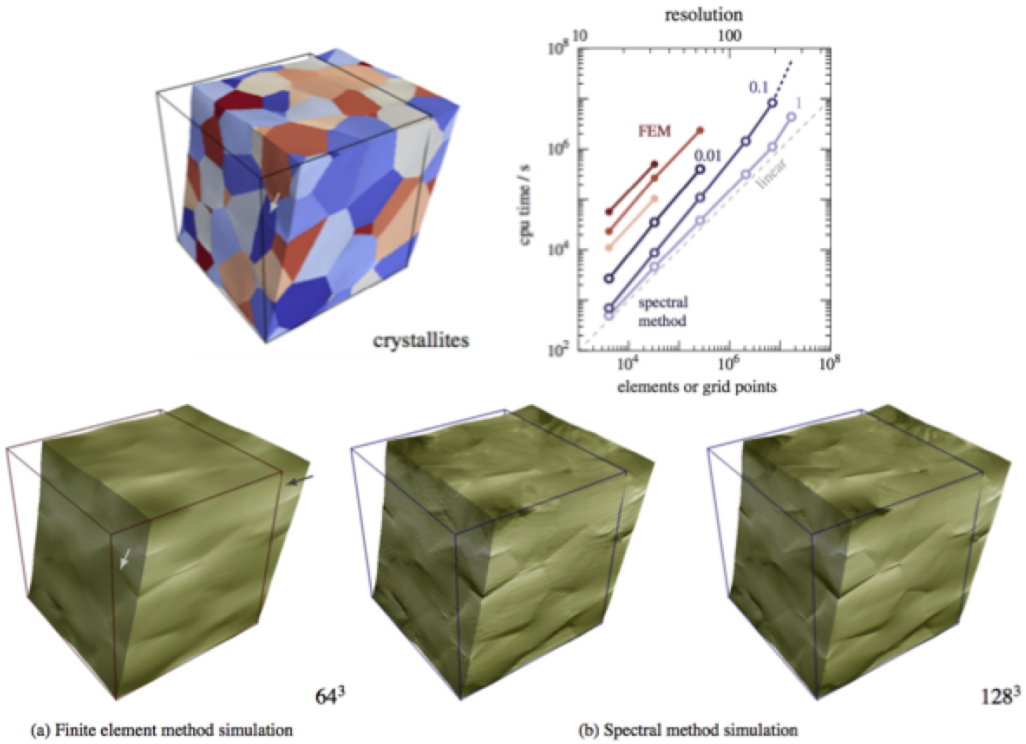


FIGURE 15 – Comparaison de simulations d'un agrégat polycristallin avec un code éléments finis et un code spectral. Le maillage est reporté en terme de nombre d'éléments au cube, ainsi que le temps de calcul pour les différentes simulations effectuées. [Eisenlohr,2013].

la direction de Laurent Capolungo, et du postdoctorat d'Amit Kumar Das et de la thèse de Kodjovi Gbémou au LEM3 [Taupin,2013, Taupin,2017]. Des études sur les géomatériaux sont aussi présentées et proviennent d'une collaboration avec l'Unité Matériaux et Transformations (UMET) de l'Université de Lille (Patrick Cordier, Xiaoyu Sun, Pierre Hirel, Philippe Carrez) [Cordier,2014, Sun,2016]. Une étude sur les fullerènes a également été menée en collaboration avec l'Institut de Physique des Solides, de l'Académie des Sciences de Russie (S. Bozhko) [Bozhko,2014].

Dans le troisième chapitre, nous présentons le développement de méthodes numériques spectrales pour la résolution des équations de champs de la mécanique des champs de dislocations. Les travaux présentés s'inscrivent essentiellement dans le cadre de la thèse de Konlam Sénam Djaka au LEM3 sous la direction de Stéphane Berbenni, et du postdoctorat d'Aurélien Villani. Ils entrent dans le cadre d'une collaboration avec Laurent Capolungo et Ricardo Lebensohn (Los Alamos National Laboratory). La majorité des développements présentés concerne la mécanique des champs de dislocations, mais les développements ont été étendus pour les désinclinaisons. Le but ici est clairement d'améliorer l'efficacité numérique des codes et de

rendre les modèles développés applicables à des microstructures tridimensionnelles réalistes. Jusqu'alors, les applications numériques de la mécanique des champs de dislocations et de désinclinaisons ont été obtenues en utilisant des méthodes éléments finis [Roy,2005, Taupin,2014b, Varadhan,2006]. C'est le cas par exemple pour les résultats montrés sur les figures 9 et 11. Le problème des méthodes éléments finis est que les temps de calcul deviennent prohibitifs pour des simulations tridimensionnelles avec des maillages importants. Une alternative aux codes éléments finis et envisagée ici est le développement de méthodes spectrales basées sur l'utilisation d'algorithmes de transformées de Fourier rapides [Moulinec,1998, Lebensohn,2012, Michel,2001]. Dans ces méthodes, le principe est, en utilisant les transformées de Fourier, de résoudre les équations voulues dans l'espace de Fourier et d'obtenir finalement la solution dans l'espace réel en utilisant les transformées de Fourier inverses. Dans le cadre de l'équation d'équilibre des contraintes en élasticité hétérogène, un problème itératif est formulé, qui fait apparaitre le tenseur de polarisation des contraintes et une fonction de Green associée à un milieu élastique homogène de référence. Le produit de convolution présent dans l'équation à résoudre devient un simple produit dans l'espace de Fourier. Cette propriété rend les méthodes spectrales très attractives numériquement, dans la mesure où l'on peut résoudre le problème à chaque point de la grille de simulation, sans avoir à construire des matrices de rigidité comme cela est fait en éléments finis. Cela permet des calculs beaucoup plus rapides et aussi une réduction de la mémoire ordinateur nécessaire. Les méthodes spectrales sont encore plus attractives du fait de la rapidité des algorithmes de transformées de Fourier directe et inverse [Frigo,1998]. Dans le cadre de la simulation de la déformation plastique d'agrégats polycristallins, des codes spectraux et éléments finis ont été comparés [Eisenlohr,2013, Liu,2010]. Il a été observé que la convergence des méthodes spectrales est meilleure que celle des éléments finis dans un cadre de déformations finies, et que les gains en terme de temps de calcul sont considérables, comme le montre la figure 15 [Eisenlohr,2013]. Cependant, des comparaisons d'évolution de textures suggèrent qu'il faut faire attention lors du développement de méthodes spectrales pour un problème donné, et qu'une comparaison avec un code éléments finis est recommandée [Liu,2010].

Dans la première partie du chapitre, nous présentons le développement de méthodes spectrales pour résoudre les équations statiques de la mécanique des champs de dislocations, d'abord en élasticité homogène [Berbenni,2014], puis en élasticité hétérogène [Djaka,2017]. Le problème consiste à se donner une distribution du tenseur densité de dislocation de Nye et à calculer le champ de contrainte interne résultant. Pour obtenir une solution élastique unique à ce problème, nous utilisons la décomposition de Stokes Helmholtz de la distorsion élastique, qui a été proposée par Acharya [Acharya,2001]. Ainsi, une première étape consiste à calculer les distorsions élastiques incompatibles reliées au tenseur de Nye au travers de l'opérateur rotationnel. La deuxième étape consiste ensuite à trouver les distorsions élastiques compatibles, qui elles servent à assurer l'équilibre des contraintes dans un problème aux limites. Une fois ces deux étapes effectuées, la distorsion élastique est complètement définie,

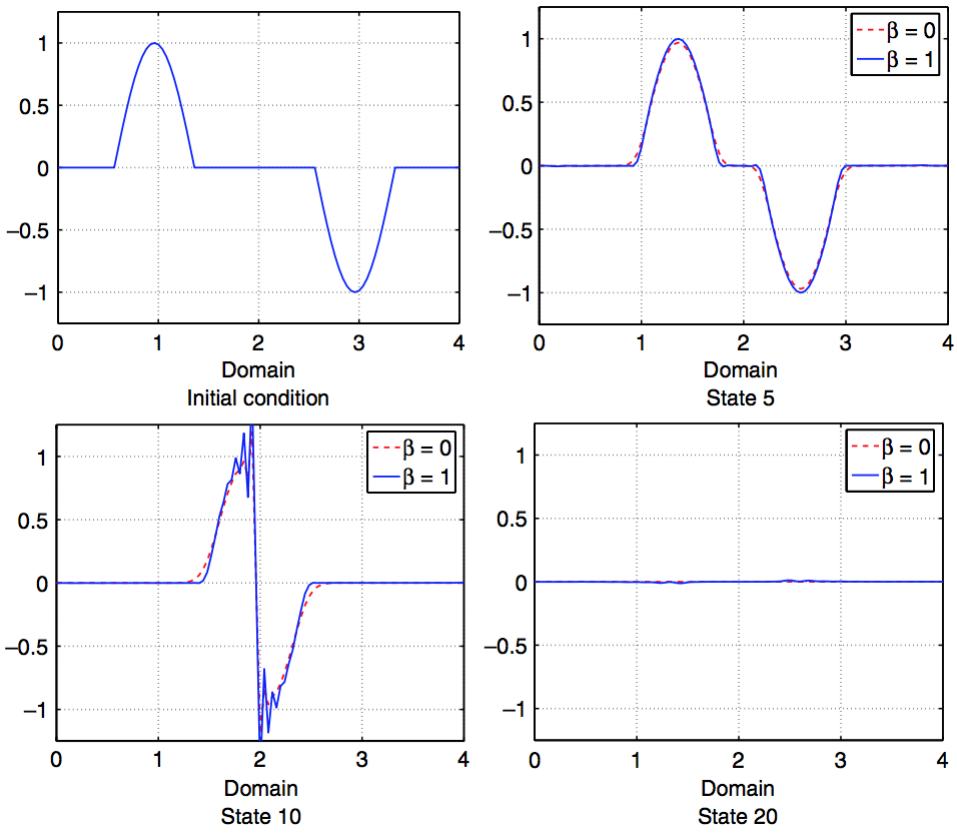


FIGURE 16 – Propagation et annihilation de deux densités de dislocation coin de signe opposé et de forme sinusoïdale, par résolution numérique de l'équation de transport en une dimension par éléments finis. Comparaison d'une méthode purement Galerkin instable ($\beta = 1$) et d'une méthode moindre carrés stable ($\beta = 0$) [Varadhan,2006].

de façon unique, et les champs de contraintes peuvent être calculés. Deux points importants sont discutés : les distorsions incompatibles sont la solution d'une équation de type Poisson ; les calculs des dérivées partielles spatiales nécessitent un traitement particulier dans l'espace de Fourier, afin d'éviter des instabilités numériques et d'obtenir une bonne précision [Berbenni,2014, Dreyer,1999, Willot,2015]. Comme applications, nous présentons des simulations de champs de dislocations dans des milieux élastiques homogènes et hétérogènes, pour certains cas en comparaison avec des solutions analytiques et des simulations par éléments finis. Le gain en terme de temps de calcul par rapport à une méthode éléments finis est aussi mis en avant.

Dans la suite du chapitre, nous présentons une méthode numérique spectrale pour résoudre l'équation de transport des densités de dislocations [Djaka,2015]. C'est un problème difficile pour deux raisons majeures. Premièrement, c'est une équation de conservation. Ainsi, les moindres perturbations numériques seront conservées et propagées par transport, de sorte qu'un crash numérique peut arriver très rapidement. La deuxième raison provient des transformées de Fourier elles-mêmes, qui tendent à générer des oscillations numériques de Gibbs lorsqu'on les appliquent à des profils spatiaux contenant des fortes variations. Les deux raisons réunies rendent le problème numérique d'autant plus compliqué. Concernant la première raison, elle a été reportée lors du développement d'une approximation par éléments finis [Roy,2005, Varadhan,2006]. Pour atténuer les perturbations numériques et leur conservation, un schéma moindres carrés a été proposé car il introduit un terme de diffusion qui permet de lisser les fortes variations de densités de dislocations non physiques. La figure 16 montre les résultats obtenus avec une méthode éléments finis Galerkin sans diffusion et avec l'ajout d'un terme de diffusion. Nous pouvons constater la suppression des instabilités numériques par un effet de lissage. L'inconvénient cependant légèrement visible sur cette figure est que les profils physiques sont eux aussi lissés, ce qui peut conduire à un étalement excessif pour des grandes distances de propagation de dislocations. Pour le développement d'une méthode numérique spectrale stable, nous avons testé des filtres spectraux [Gottlieb,2001]. Parmi les filtres discutés dans la littérature, nous présentons un filtre exponentiel passe-bas [Djaka,2015]. Il est réglable et permet de filtrer les perturbations de haute fréquence qui correspondent au bruit numérique. Nous présentons une étude numérique détaillée en comparison notamment avec la méthode éléments finis moindres carrés [Varadhan,2006]. Le gain en terme de temps de calcul par rapport à une méthode éléments finis est aussi mis en avant. Dans la dernière partie du chapitre, nous combinons les progrès réalisés sur la résolution des champs élastiques et sur la résolution de l'équation de transport pour obtenir une approximation numérique spectrale complète de la mécanique des champs de dislocations. Cette partie présente brièvement l'implémentation récente de la théorie mésoscopique des champs de dislocations dans la formulation élastoviscoplastique EVPFFT [Lebensohn,2012, Djaka,2019], en vue de la simulation d'agrégats polycristallins.

Chapitre 1

Mécanique des champs de dislocations

1.1 Equations de champs

Nous nous plaçons maintenant et pour la suite du mémoire dans un cadre de petites perturbations. En mécanique des milieux continus, le déplacement matériel **u** est défini continu en tout point d'un domaine. La distorsion totale est le gradient du champ de déplacement $\mathbf{U} = \mathbf{grad}\ \mathbf{u}$. C'est un tenseur compatible et son rotationnel est nul :

$$\mathbf{rot}\ \mathbf{U} = \mathbf{0}. \tag{1.1}$$

Connaissant la valeur du déplacement en un point donné, il est possible de déterminer la valeur en un point différent en intégrant la distorsion le long d'un circuit reliant ces deux points. Si les points d'arrivée et de départ sont identiques, le circuit est fermé et l'intégration de la distorsion le long de ce circuit ne doit pas donner de déplacement supplémentaire, de sorte que les déplacements aux points de départ et d'arrivée sont identiques. C'est effectivement le cas si la distortion est le gradient du vecteur déplacement. Dans un cadre élastoplastique, la distorsion totale est décomposée en une partie plastique $\mathbf{U_p}$ et une partie élastique $\mathbf{U_e}$:

$$\mathbf{U} = \mathbf{U_e} + \mathbf{U_p}. \tag{1.2}$$

Considérons maintenant, comme le montre la figure 1.1, une surface élémentaire S, de normale unitaire **n**, et délimitée par un circuit de Burgers C. Imaginons qu'une

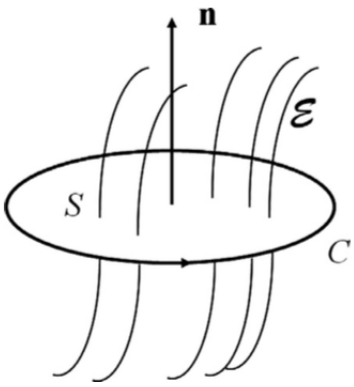


FIGURE 1.1 – Surface S de normale **n** délimitée par un circuit de Burgers C et coupée par un ensemble de lignes de dislocations ξ [Taupin,2016].

ou plusieurs lignes de dislocations coupent cette surface. Si le vecteur de Burgers net de la ligne de dislocation, ou de l'ensemble des lignes de dislocations, est non nul, il existe une discontinuité du champ de déplacement élastique (ou plastique, au signe près). Contrairement à la distorsion totale, l'intégration de la distorsion élastique le long du circuit de Burgers donne un saut de déplacement élastique entre le point final et celui de départ, qui correspond au vecteur de Burgers net **b** de la ligne ou des lignes de dislocations coupant la surface S. Nous avons donc, avec **r** dénotant le vecteur position :

$$\mathbf{b} = \int_C \mathbf{U}_e \cdot \mathbf{dr}. \tag{1.3}$$

Utile par la suite, l'application du théorème de Stokes à l'équation ci-dessus donne :

$$\mathbf{b} = \int_S \mathbf{rot}\ \mathbf{U_e} \cdot \mathbf{n} dS. \tag{1.4}$$

Définissons maintenant le tenseur densité de dislocation de Nye. c'est un tenseur de second ordre qui s'écrit :

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{b} \otimes \mathbf{t}. \tag{1.5}$$

En terme de composantes, l'équation (1.5) s'écrit :

$$\alpha_{ij} = b_i t_j. \tag{1.6}$$

Dans un repère cartésien $(\mathbf{e_1}, \mathbf{e_2}, \mathbf{e_3})$, la quantité b_i représente la longueur de vecteur de Burgers dans la direction $\mathbf{e_i}$, par unité de surface S. Le terme t_j représente la direction de la ligne de dislocation dans la direction $\mathbf{e_j}$. On remarque donc que les termes diagonaux du tenseur $\boldsymbol{\alpha}$ représentent des dislocations vis pour lesquelles $\mathbf{b}$ et $\mathbf{t}$ sont colinéaires alors que les termes non diagonaux définissent les dislocations coins pour lesquelles le vecteur $\mathbf{b}$ est orthogonal au vecteur $\mathbf{t}$. Les composantes $\alpha_{\mathbf{ij}}$ sont des densités surfaciques qui s'expriment comme des mètres de vecteur de Burgers par unité de surface. L'unité est donc m^{-1}. Au contraire, les densités de dislocations statistiques considérées dans les théories conventionnelles de plasticité cristalline s'expriment en longueur de ligne de dislocations par unité de volume, conduisant à une unité en m^{-2}. Le tenseur de Nye caractérise ce que l'on appelle aussi les densités de dislocations géométriquement nécessaires, ou encore polarisées ou en excès. A une échelle de résolution mésoscopique, comme celle utilisée sur la figure 1.1, il représente la polarisation résultante des lignes de dislocations. Dans un cas extrême où l'ensemble des lignes de dislocations coupant la surface S donne lieu à un vecteur de Burgers globalement nul, alors le tenseur de Nye résultant est nul, et la densité de dislocations est purement statistique. Si maintenant l'échelle de résolution spatiale, c'est à dire la taille du circuit de Burgers C, est choisie très faible, de l'ordre des distances interatomiques, alors une ligne de dislocation et son coeur seront décrits par une distribution spatiale de densité de dislocation $\boldsymbol{\alpha}$, chaque valeur locale de la densité portant une partie élémentaire du vecteur de Burgers total de la ligne de dislocation. Cela nous permettra de revisiter le problème de Peierls-Nabarro dans la suite du chapitre [Peierls,1940, Nabarro,1947, Gbemou,2016]. Etant donnée la définition du tenseur de Nye, le vecteur de Burgers net de l'ensemble des lignes de dislocations traversant la surface S de normale $\mathbf{n}$ et délimitée par la courbe C peut se calculer comme :

$$\mathbf{b} = \int_S \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{n} dS. \tag{1.7}$$

Il est maintenant intéressant de joindre les équations 1.4 et 1.7, ce qui permet d'écrire :

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{rot}\ \mathbf{U_e}. \tag{1.8}$$

La relation ci-dessus permet de s'affranchir des formulations intégrales et singulières (1.4,1.7) au profit d'une formulation locale et continue. La discontinuité du

vecteur de Burgers est maintenant régularisée au travers d'une distribution spatiale continue de densité de dislocation, à laquelle est associé un champ continu élastique $\mathbf{U_e}$. Comme nous allons le montrer plus loin dans ce chapitre, cette régularisation du vecteur de Burgers permet d'obtenir des champs élastiques (déformations, contraintes) non singuliers au niveau du coeur des dislocations, alors que les solutions classiques y sont singulières et non applicables [Hirth,1982, Hull,2001].

Dans l'équation 1.8, l'opérateur rotationnel extrait la partie incompatible de la distorsion élastique, la partie qui n'est pas un tenseur gradient compatible, et qui donne lieu à une discontinuité du déplacement élastique par intégration le long du circuit de Burgers. Cette équation relie la partie incompatible de la distorsion élastique au tenseur de Nye. Nous différencions maintenant un tenseur compatible comme étant un tenseur qui s'écrit sous la forme d'un gradient et dont le rotationnel est nul, d'un tenseur incompatible qui ne peut pas s'écrire comme un gradient mais comme un rotationnel, et dont le rotationnel est non nul mais la divergence est nulle. A noter donc que l'opérateur divergence extrait la partie compatible d'un tenseur et élimine la partie incompatible. Ainsi, nous décomposons la distorsion élastique en une partie incompatible $\mathbf{U_e^{\perp}}$ qui est un rotationnel, et une partie compatible $\mathbf{U_e^{\parallel}}$ qui est un gradient. De même, nous décomposons la distorsion plastique en une partie incompatible $\mathbf{U_p^{\perp}}$ et une partie compatible $\mathbf{U_p^{\parallel}}$. Nous appliquons donc la décomposition de Stokes Helmholtz qui a été proposée par Acharya [Acharya,2001] :

$$\mathbf{U_e} = \mathbf{U_e^{\perp}} + \mathbf{U_e^{\parallel}} = \mathbf{rot}\boldsymbol{\chi} + \mathbf{grad\ w} \tag{1.9}$$

$$\mathbf{U_p} = \mathbf{U_p^{\perp}} + \mathbf{U_p^{\parallel}} = -\mathbf{rot}\boldsymbol{\chi} + \mathbf{grad\ z} \tag{1.10}$$

Nous voyons dans les équations ci-dessus que les parties élastiques et plastiques incompatibles doivent être opposées, de sorte que la distortion totale soit un tenseur compatible. Etant donnée une distribution de dislocation $\boldsymbol{\alpha}$ dans un domaine B avec des frontières extérieures ∂B, il est possible de déterminer les distorsions élastiques incompatibles au travers de l'équation 1.8 qui devient :

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{rot}\ \mathbf{U_e^{\perp}}. \tag{1.11}$$

Pour obtenir une solution unique et s'assurer que la solution obtenue est purement rotationnelle et ne contient pas de partie gradient compatible qui disparaîtrait lors de l'application de l'opérateur rotationnel, il faut aussi satisfaire :

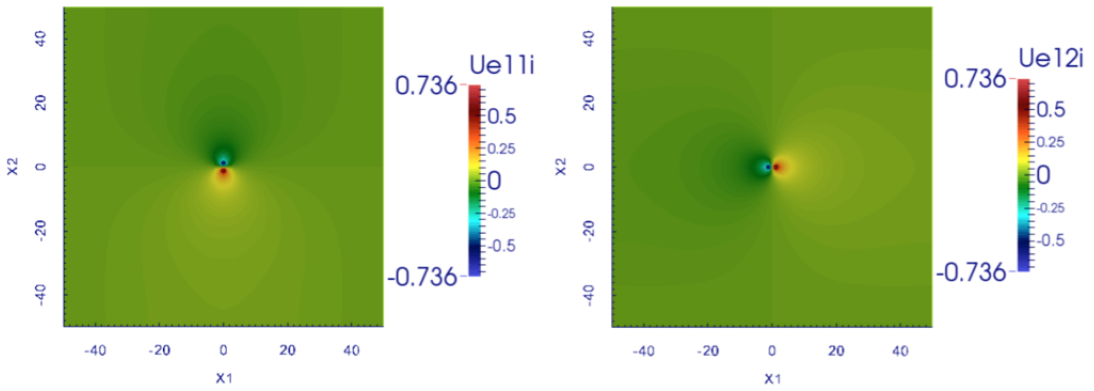


FIGURE 1.2 – Distribution des distorsions élastiques incompatibles $U_{11}^{e\perp}$ et $U_{12}^{e\perp}$ dues à la présence d'une densité de dislocation coin α_{13} répartie sur quelques noeuds au centre du domaine. Cette densité de dislocation correspond à une ligne de dislocation coin infinie et rectiligne suivant la direction normale à la figure, avec un vecteur de Burgers horizontal.

$$\mathbf{div}\ \mathbf{U_e^{\perp}} = 0 \quad d\mathit{ans}\ B \tag{1.12}$$

$$\mathbf{U}_e^{\perp} \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \mathit{sur}\ \partial B \tag{1.13}$$

En appliquant l'opérateur rotationnel à l'équation 1.11, en utilisant l'identité **rot rot A** = **grad div A** − **div grad A** et l'équation 1.12, la distorsion élastique incompatible doit être solution de l'équation :

$$\mathbf{div\ grad}\ \mathbf{U}^{\mathbf{e}\perp} = \boldsymbol{\Delta}\mathbf{U}^{\mathbf{e}\perp} = -\mathbf{rot}\ \boldsymbol{\alpha}\ \text{dans}\ B, \tag{1.14}$$

$$\mathbf{U}^{\mathbf{e}\perp} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0}\ \text{sur}\ \partial B, \tag{1.15}$$

où le symbole $\boldsymbol{\Delta}$ dénote l'opérateur Laplacien. L'équation ci-dessus est une équation de type Poisson. Dans l'application montrée dans la figure 1.2, nous avons utilisé la méthode des éléments finis et le logiciel FreeFem++ [Hecht,2012, Hecht,2017] pour calculer les distorsions élastiques incompatibles associées à une densité de dislocation coin dans un problème bidimensionnel. Cette densité de dislocation correspond à une ligne de dislocation coin infinie et rectiligne suivant la direction normale à la figure, avec un vecteur de Burgers horizontal.

Il reste maintenant à déterminer la partie compatible $\mathbf{U}_\mathbf{e}^{\|}$ afin de connaître la distorsion élastique totalement. La partie compatible sert à satisfaire l'équilibre des contraintes dans un problème aux limites. Appelons $\mathbf{T}$ le tenseur des contraintes

symétrique de Cauchy et $\mathbf{C}$ le tenseur des modules élastiques d'ordre 4. Considérons que le domaine B est potentiellement soumis à des déplacements et à des tractions sur ses bords extérieurs. Le tenseur des contraintes s'écrit donc :

$$\mathbf{T} = \mathbf{C} : \mathbf{U}_e = \mathbf{C} : (\mathbf{U}_e^{\perp} + \mathbf{U}_{\mathbf{e}}^{\parallel}), \tag{1.16}$$

et doit satisfaire l'équation d'équilibre :

$$\mathbf{div}\ \mathbf{T} = \mathbf{div}\ (\mathbf{C} : (\mathbf{U}_{\mathbf{e}}^{\perp} + \mathbf{U}_{\mathbf{e}}^{\parallel})) = \mathbf{0}. \tag{1.17}$$

En utilisant finalement la définition de $\mathbf{U}_{\mathbf{e}}^{\parallel}$ dans la relation 1.9, et en définissant le vecteur $\mathbf{f}^{\perp} = \mathbf{div}\ (\mathbf{C} : \mathbf{U}_e^{\perp})$, on doit satisfaire l'équation :

$$\mathbf{div}\ \ (\mathbf{C} : \mathbf{grad}\ \mathbf{w}) + \mathbf{f}^{\perp} = \mathbf{0}, \tag{1.18}$$

où l'inconnu est le champ de déplacement élastique $\mathbf{w}$. Nous remarquons que c'est un problème d'élasticité classique avec une force volumique supplémentaire $\mathbf{f}^{\perp}$ provenant de l'incompatibilité élastique associée aux dislocations. Une fois $\mathbf{w}$ connu, nous pouvons calculer la partie compatible $\mathbf{U}_{\mathbf{e}}^{\parallel}$, de sorte que nous connaissons la distorsion élastique totale et pouvons évaluer le tenseur des contraintes. La figure 1.3 montre les champs de contraintes internes prédits pour la distribution de densité de dislocation coin considérée précédemment. Nous avons utilisé une élasticité isotrope linéaire pour l'aluminium. Là encore, une approximation éléments finis a été utilisée. Nous retrouvons des champs de contraintes semblables aux solutions analytiques pour une dislocation coin [Hirth,1982], sauf au niveau du coeur où la solution est non singulière.

Nous présentons maintenant brièvement une autre partie importante de la mécanique des champs de dislocations, qui concerne la plasticité et le transport des densités de dislocations. En présence de contraintes, les densités de dislocations peuvent se déplacer avec une vitesse définie par le vecteur vitesse $\mathbf{V}_{\alpha}$. L'évolution de la densité de dislocation est régie par l'équation de transport des dislocations [Mura,1963, Acharya,2001, Varadhan,2006] :

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = -\mathbf{rot}\ \dot{\mathbf{U}}_p, \tag{1.19}$$

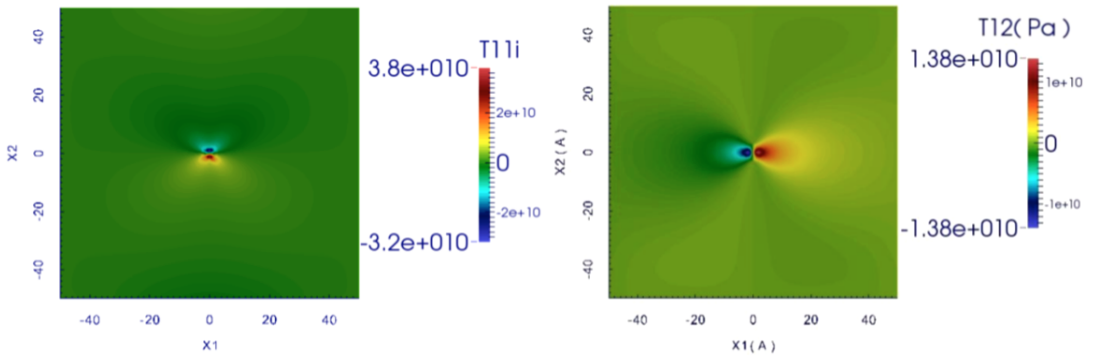


FIGURE 1.3 – Distribution des contraintes internes σ_{11} et σ_{12} (Pa) dues à la présence d'une densité de dislocation coin α_{13} répartie sur quelques noeuds au centre du domaine. Cette densité de dislocation correspond à une ligne de dislocation coin infinie et rectiligne suivant la direction normale à la figure, avec un vecteur de Burgers horizontal.

où la vitesse de distorsion plastique $\dot{\mathbf{U}}_p$ est :

$$\dot{\mathbf{U}}_p = \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{V}_\alpha. \tag{1.20}$$

Les forces motrices de type Peach-Koehler $\mathbf{F}_\alpha$ agissant sur les densités de dislocations sont :

$$\mathbf{F}_\alpha = \mathbf{T}.\boldsymbol{\alpha} : \mathbf{X}. \tag{1.21}$$

$\mathbf{X}$ est le tenseur de permutation. Ces forces sont reliées à la mobilité des dislocations de façon à assurer une dissipation positive [Acharya,2001]. Le choix le plus simple est d'adopter des lois visqueuses :

$$V_l^\alpha = \frac{F_l^\alpha}{B_\alpha} = \frac{1}{B_\alpha} e_{jkl} T_{ij} \alpha_{ik} \tag{1.22}$$

où B_α est un coefficient de viscosité positif. L'équation de transport est de nature hyperbolique et traduit la conservation du vecteur de Burgers au travers de surfaces élémentaires. Sa résolution numérique nécessite des traitements particuliers pour assurer une stabilité numérique. Dans le cas d'une approximation par éléments finis, une méthode Galerkin classique ne fonctionne pas du tout car des perturbations numériques se forment très vite, et elles sont conservées et propagées, de sorte que les simulations numériques se terminent rapidement par l'apparition de fortes insta-

bilités numériques. Récemment, une approximation basée sur un schéma moindres carrés a été proposée [Roy,2005, Varadhan,2006]. Un terme de diffusion propre au schéma permet de lisser les petites perturbations numériques qui sont susceptibles d'apparaître, de sorte que les solutions numériques deviennent stables. Le prix à payer néanmoins est un léger étalement spatial des densités de dislocations. La figure 11 dans l'introduction de ce mémoire montre la simulation d'une source de Frank Read à l'aide de l'équation de transport des dislocations, à l'aide d'une approximation par éléments finis [Varadhan,2006]. Pour terminer, nous précisons qu'à une échelle de résolution mésoscopique, il est nécessaire de prendre en compte la mobilité des densités de dislocations statistiques dans la vitesse de distorsion plastique [Roy,2006]. Le modèle ainsi obtenu correspond à la mécanique des champs de dislocations mésoscopique (MFDM, pour Mesoscopic Field Dislocation Mechanics). La vitesse de distorsion plastique s'écrit alors :

$$\dot{\mathbf{U}}_p = (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{V}_\alpha + \boldsymbol{L}_p), \tag{1.23}$$

où $\boldsymbol{L}_p$ est le tenseur des vitesses de glissement plastique utilisé dans les modèles de plasticité cristalline :

$$\boldsymbol{L}_p = \sum_s \dot{\gamma}_s^p \mathbf{m_s} \otimes \mathbf{n_s} = \sum_s \dot{\gamma}_s^p \boldsymbol{P}_s. \tag{1.24}$$

Dans la relation ci-dessus, $\dot{\gamma}_s^p$ est la vitesse de cisaillement plastique du système de glissement s caractérisé la direction de glissement $\mathbf{m_s}$ et la normale au plan de glissement $\mathbf{n_s}$. $\mathbf{P_s}$ est le tenseur d'orientation de Schmid. Le glissement plastique sur un système s est activé par la contrainte de cisaillement projetée $\tau_s = \mathbf{T} : \mathbf{P_s}$, au travers d'une loi constitutive du type :

$$\dot{\gamma}_s^p = \dot{\gamma}_0^p (|\tau_s|/\tau_0)^n sign(\tau_s). \tag{1.25}$$

Les paramètres $\dot{\gamma}_0^p$, τ_0 et n sont des paramètres matériau, et correspondent à une vitesse de déformation et une contrainte de référence, et à un exposant. A l'échelle mésoscopique, l'équation de transport devient :

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = -\mathbf{rot}\ (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{V}_\alpha + \boldsymbol{L}_p). \tag{1.26}$$

En partant d'une distribution spatiale du tenseur de Nye $\boldsymbol{\alpha}$ nulle, l'équation 1.26 va générer automatiquement des densités de dislocations géométriquement nécessaires pour accommoder les incompatibilités de distorsions plastiques provenant

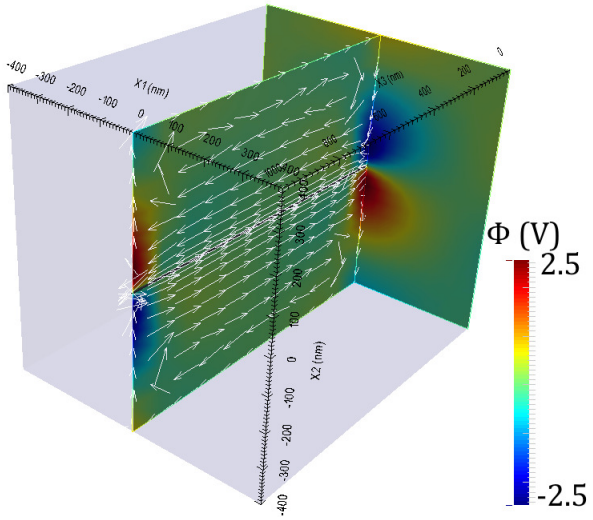


FIGURE 1.4 – Simulation d'une ligne de dislocation coin traversante α_{13} dans un domaine 3D de GaN. La ligne est localisée suivant $x_1 = x_2 = 0$ et est orientée suivant la direction x_3 (ligne noire sur la figure). Le vecteur de Burgers est suivant la direction x_1. Le potentiel électrique induit par la ligne de dislocation au voisinage des surfaces extérieures est montré en couleur. Les flèches blanches montrent l'orientation du champ de déplacement électrique.

de la mobilité des densités de dislocations statistiques. Un tel modèle permet de rendre compte de la formation et du mouvement de structures polarisées de dislocations avec des tailles caractéristiques, ce qui permet d'étudier les effets de taille et les trajets complexes de déformation [Taupin,2007].

1.2 Couplage avec les milieux piézoélectriques

Nous présentons ici un modèle couplant la mécanique des champs de dislocations aux équations de champs des milieux piézoélectriques [Taupin,2014a]. Comme il l'a été mentionné dans l'introduction, cette étude constitue une étape préliminaire en vue de coupler la mécanique des champs de dislocations aux équations du micromagnétisme, et entre dans le cadre d'une collaboration avec l'Institut de Physique des Solides de l'Académie des Sciences de Russie. L'un des objectifs de cette étude est aussi de montrer comment la mécanique des champs de dislocations, et particulièrement les distorsions élastiques incompatibles associées au tenseur de Nye, peuvent s'insérer dans un autre modèle. Le modèle développé ici permet de prédire l'impact des dislocations sur les champs électriques, et réciproquement l'influence de champs électriques sur la mobilité des dislocations. Les dislocations sont observées dans les matériaux piézoélectriques, par exemple dans des couches de GaN déposées sur des substrats où des lignes de dislocations traversantes se forment pour accom-

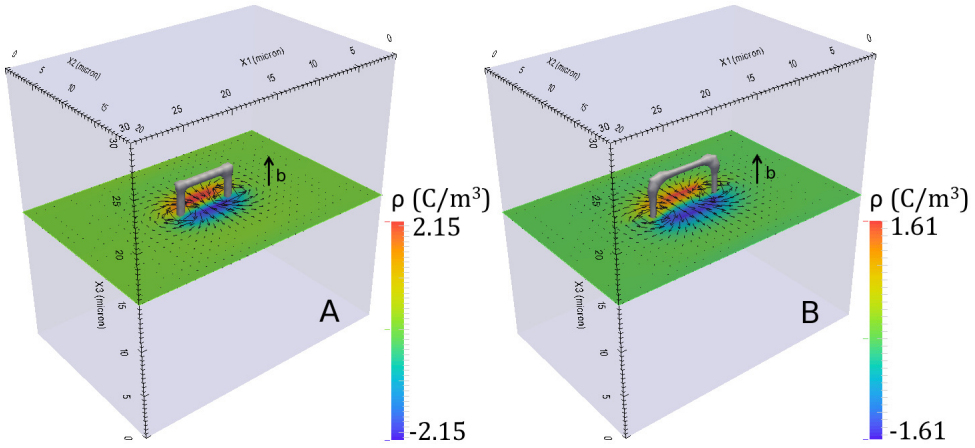


FIGURE 1.5 – Boucle de dislocation carrée dans un domaine de Wurtzite. Le vecteur de Burgers est suivant la direction x_3. La boucle est composée de segments horizontaux α_{31} et de segments verticaux α_{33}. Seulement la partie supérieure de la boucle est visible. A. Configuration initiale. B. Expansion de la boucle lors de l'application d'un champ électrique. La densité de charge ρ est montrée en couleur. Les flèches montrent l'orientation du déplacement électrique dû à la boucle de dislocation.

moder les incompatibilités cristallines entre le film et le substrat [Wu,1996]. Pour des matériaux ayant des coefficients piézoélectriques importants, tel que GaN, les dislocations peuvent générer des polarisations piézoélectriques significatives [Shi,1999, Maciejewski,2006, Han,2012]. Des études expérimentales ont aussi montré que les lignes de dislocations peuvent être chargées électriquement en surface, à cause des champs élastiques et de la capacité des coeurs de dislocations à piéger des électrons [Hansen,1998, Im,1994, Cherns,2002]. Egalement importants, les champs électriques peuvent activer la déformation plastique par la mise en mouvement et la formation de structures de dislocations, entraînant un vieillissement et une dégradation progressive des matériaux [Lester,1995, Wills,1969, Murray,1991, Kugaenko,2013]. Nous présentons ici l'essentiel du modèle développé et quelques résultats issus de la référence [Taupin,2014a]. Les équations statiques du modèle sont les suivantes :

$$\begin{aligned}
\mathbf{rot}\ \mathbf{U}_\mathbf{e}^\perp &= -\mathbf{rot}\ \mathbf{U}_\mathbf{p}^\perp = \boldsymbol{\alpha} && (1.27)\\
\mathbf{div}\ \mathbf{U}_\mathbf{e}^\perp &= \mathbf{div}\ \mathbf{U}_\mathbf{p}^\perp = 0 && (1.28)\\
\mathbf{U}_e^\perp \cdot \mathbf{n} &= \mathbf{U}_p^\perp \cdot \mathbf{n} = 0 \quad sur\ \partial B && (1.29)\\
\mathbf{div}\ \mathbf{T} &= \mathbf{div}\ (\mathbf{C} : (\mathbf{U} - \mathbf{U_p})^{sym} - \mathbf{f}^t \cdot \mathbf{E}) = \rho_m \ddot{\mathbf{u}}, && (1.30)\\
\mathbf{div}\ \mathbf{D} &= \mathbf{div}\ (\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{f} \cdot (\mathbf{U} - \mathbf{U_p})^{sym}) = 0, && (1.31)
\end{aligned}$$

Dans les équations ci-dessus, $\mathbf{D}$ est le vecteur des déplacements électriques, $\mathbf{T}$

et le tenseur des contraintes de Cauchy. On observe le couplage piézoélectrique au travers du tenseur des modules piézoélectriques $\mathbf{f}$, qui relie les contraintes au champ électrique $\mathbf{E}$ et le déplacement électrique $\mathbf{D}$ aux distorsions élastiques. Le tenseur des distorsions élastiques est $\mathbf{U_e} = (\mathbf{U} - \mathbf{U_p})$, où $\mathbf{U} = \mathbf{grad}\ \mathbf{u}$ est la distorsion totale qui s'écrit comme le gradient du champ de déplacement $\mathbf{u}$, et $\mathbf{U_p}$ est la distorsion plastique. Le couplage des équations des milieux piézoélectriques avec la mécanique des champs de dislocations s'effectue simplement au travers de la distorsion plastique $\mathbf{U_p}$. En effet, en se donnant initialement une distribution de densité de dislocation au travers du tenseur de Nye, nous pouvons calculer la distorsion plastique incompatible associée, solution des équations 1.27, 1.28 et 1.29. La distorsion plastique obtenue intervient ensuite dans les équations d'équilibre (1.30,1.31), de sorte que l'effet des distorsions plastiques incompatibles va directement se répercuter sur les contraintes et sur les déplacements électriques. Le champ électrique s'écrivant $\mathbf{E} = -\mathbf{grad}\ \phi$, où ϕ est un potentiel électrique, les inconnues du problème d'équilibre sont le potentiel électrique ϕ et le vecteur des déplacements $\mathbf{u}$, avec des conditions aux limites sur les contraintes, le champ électrique, les déplacements et le potentiel électrique. La polarisation électrique $\mathbf{P}$ correspond au terme $\mathbf{f} \cdot (\mathbf{U} - \mathbf{U_p})^{sym}$ et sa divergence donne la densité de charge ρ.

Un premier résultat est montré sur la figure 1.4. En accord avec les données théoriques et expérimentales disponibles dans la littérature, nous prédisons avec le modèle proposé que les lignes de dislocations coins, à cause des distorsions élastiques qu'elles induisent et du couplage piézoélectrique, entraînent la formation de potentiels électriques de surface de plusieurs volts, pour assurer l'équilibre du champ électrique. On trouve ces potentiels sous forme de dipôles. Les observations expérimentales montrent que certaines dislocations sont chargées en surface, par un phénomène de piégeage d'électrons par le coeur des dislocations. Cela pourrait être inclus dans le modèle par l'ajout d'une densité de charge comme propriété de la ligne de dislocation, en plus du vecteur de Burgers. Un deuxième résultat intéressant prédit par le modèle est le transport des dislocations assisté par l'application d'un champ électrique. En effet, l'équation de transport et les forces motrices de type Peach-Koehler présentées dans la partie précédente s'appliquent directement dans le modèle piézoélectrique. Les forces motrices font intervenir le tenseur des contraintes de Cauchy, qui inclut ici l'effet du champ électrique au travers des coefficients piézoélectriques, de sorte qu'il est possible de mettre en mouvement des dislocations par l'application d'un champ électrique seul. Ensuite, le transport des densités de dislocations va modifier la distribution des distorsions plastiques, ce qui modifiera la distribution des champs élastiques et électriques. La figure 1.5 montre la croissance d'une boucle de dislocation sous l'action d'un champ électrique appliqué, et l'évolution de la densité de charge qui suit la croissance de la boucle.

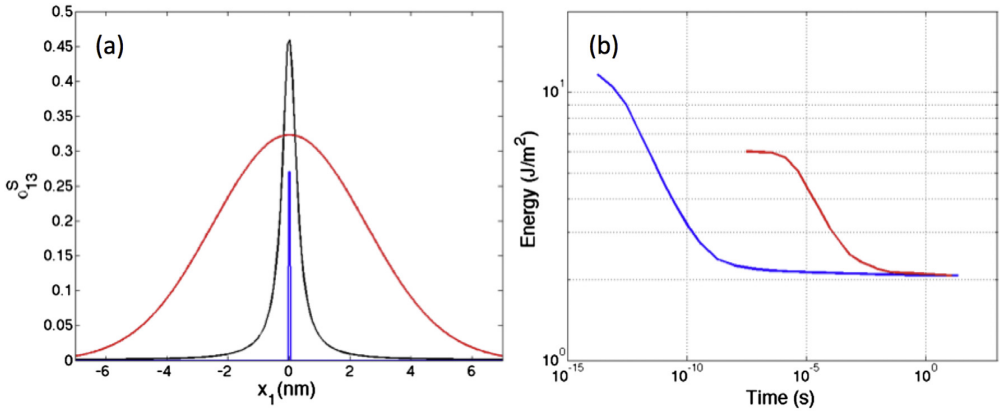


FIGURE 1.6 – (a) : Densités de dislocations coins α^S_{13}. La courbe bleue est la distribution du cœur de la dislocation coin initialement compacte (amplitude divisée par 30), la courbe rouge la distribution du cœur de la dislocation coin initialement diffuse (amplitude multipliée par 5) et la courbe noire la structure équilibrée obtenue après relaxation des deux distributions initiales. (b) : Evolution dans le temps des énergies de cœur de la dislocation compacte (bleue) et diffuse (rouge).

1.3 Modélisation des coeurs de dislocations

Le modèle de Peierls-Nabarro [Peierls,1940, Nabarro,1947] a posé la question fondamentale de la structure d'équilibre des coeurs de dislocations dans un cristal et de la contrainte associée nécessaire pour déplacer les dislocations au travers de barrières énergétiques dans le cristal, la célèbre contrainte de Peierls. Initialement développé pour les structures de dislocations planaires, ce modèle représente le coeur des dislocations par une densité surfacique de dislocation, dont l'intégration le long du coeur donne le vecteur de Burgers. Une configuration équilibrée du coeur de la dislocation est obtenue lorsque la contrainte de cisaillement due à la densité de dislocation est compensée par une force de rappel du réseau cristallin. Cette dernière est associée à une énergie cristalline non convexe, qui traduit la résistance du cristal au cisaillement. Cette énergie de coeur est fonction du misfit, c'est à dire de la discontinuité de déplacement élastique/plastique générée par la dislocation. De cette structure équilibrée, caractérisée notamment par son épaisseur de coeur, peut être estimée la contrainte de Peierls. Des modèles récents plus élaborés ont proposé de remplacer le potentiel sinusoïdal phénoménologique de Peierls par des énergies de faute d'empilement généralisées obtenues à partir de simulations atomistiques [Joós,1994, Hartford,1998, Lu,2000, Schoeck,2012, Wang,2014]. Ces modèles introduisent des paysages énergétiques bidimensionnels qui donnent la résistance du cristal au cisaillement dans toutes les directions d'un plan de glissement. Une propriété remarquable de ces modèles est la possibilité de prédire des dissociations de coeurs

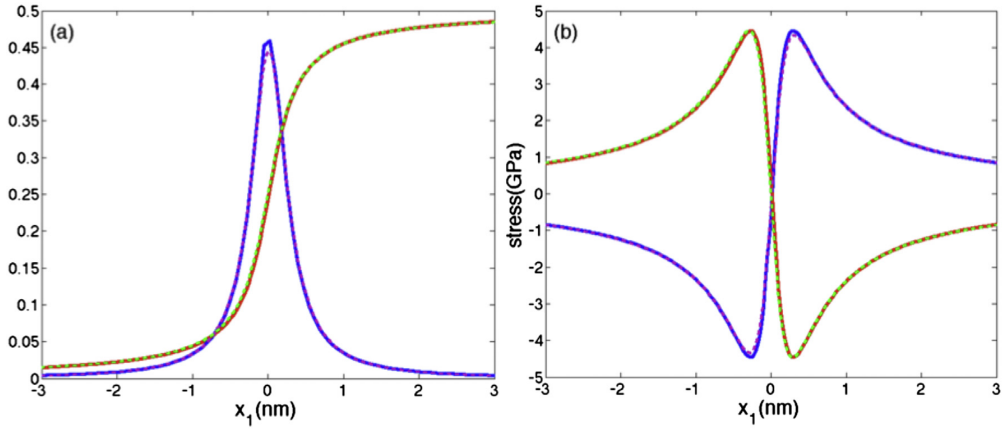


FIGURE 1.7 – Structure relaxée du coeur d'une dislocation coin obtenue en utilisant le potentiel sinusoïdal de Peierls. (a) : La courbe bleue est la densité de dislocation α_{13}^S. La solution de Peierls-Nabarro est tracée en pointillés violets. La courbe rouge est la discontinuité de déplacement élastique η_{12}, la courbe en pointillés verts est la solution de Peierls-Nabarro. (b) : Contraintes dans le plan de glissement. La courbe bleue est la contrainte de cisaillement T_{12}, la solution de Peierls-Nabarro est tracée en pointillés violets. La courbe rouge est la contrainte de rappel T_{12}^R, La courbe en pointillés verts est la solution de Peierls-Nabarro.

de dislocations en partielles. Des modèles de type champs de phases [Rodney,2003] peuvent également prédire les structures de coeurs multi-planaires et leur contrainte de Peierls, notamment dans les métaux cubiques centrés, et s'attaquent également aux interactions avec les joints de grains [Denoual,2004, Denoual,2007, Shen,2004, Hunter,2014, Zeng,2016]. Dans cette partie, nous montrons comment la mécanique des champs de dislocations et son équation de transport peuvent s'appliquer au problème de Peierls-Nabarro. Nous présentons quelques résultats issus de la thèse de Kodjovi Gbémou et publiés dans la référence [Gbemou,2016]. Cette étude a été motivée pour répondre à une question fondamentale spécifique à la mécanique des champs de dislocations : une distribution de densité de dislocation va toujours avoir tendance à s'étaler de façon à relaxer les champs de contraintes internes associés. Il est donc nécessaire d'introduire des forces de rappel physiquement justifiées qui s'opposent à cet étalement, de façon à pouvoir prédire des structures de dislocations en équilibre.

Dans le modèle de Peierls-Nabarro, le coeur planaire d'une dislocation de vecteur de Burgers d'amplitude b est représentée par une distribution continue de densité surfacique de dislocations $\alpha^s(x)$ répartie le long du plan de glissement suivant la direction x. A cette densité est associée la discontinuité de déplacement élastique η, qui varie de 0 à b lorsqu'on intègre la densité de dislocation au travers du coeur.

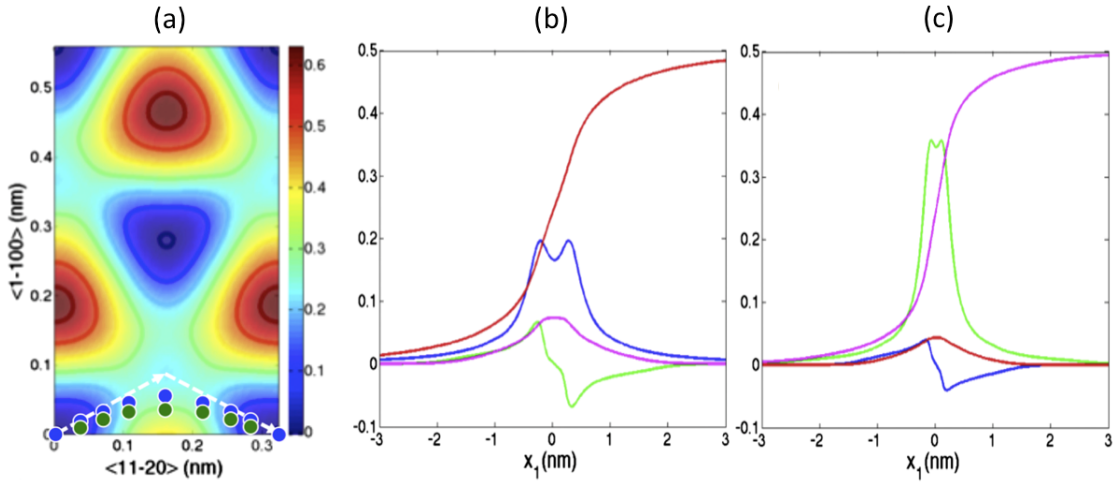


FIGURE 1.8 – (a) : Energie de faute d'empilement généralisée dans le plan basal du zirconium obtenue à partir de calculs Ab-initio. Les flèches en pointillés blancs indiquent le chemin d'énergie minimale pour la dissociation de la dislocation parfaite en dislocations partielles. Les ronds bleus et verts montrent les chemins d'énergie correspondants aux dislocations partielles coin et vis prédites par le modèle. (b,c) : Structures relaxées dissociées de la dislocation coin (b) et vis (c) dans le plan basal du zirconium. la courbe de couleur bleue est la densité de dislocation coin α_{13}^S, la courbe de couleur rouge est la discontinuité de déplacement élastique η_{12} associée (en unité $2b$). La courbe verte est la densité de dislocation vis α_{33}^S, la courbe de couleur magenta est la discontinuité de déplacement élastique η_{32} associée (en unité $2b$).

Nous avons donc les relations :

$$\eta(x) = \int_{-\infty}^{x} \alpha^s(x)\, dx, \tag{1.32}$$

$$\frac{\partial \eta(x)}{\partial x} = \alpha^s(x), \tag{1.33}$$

Dans le plan de glissement, la densité de dislocation génère un champ de contrainte de cisaillement interne. En supposant une élasticité homogène linéaire isotrope, la contrainte de cisaillement engendrée en un point x est donnée par la relation :

$$T(x) = \frac{K}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\alpha^s(x')}{x - x'}\, dx'. \tag{1.34}$$

K est un coefficient d'élasticité et vaut $K = \mu(cos^2\theta + \frac{1}{1-\nu} sin^2\theta)$, où θ représente l'angle entre la ligne de dislocation et le vecteur de Burgers de la dislocation. μ et ν dénotent respectivement le module de cisaillement et le coefficient de Poisson du matériau. Dans le cas d'une dislocation coin, $K = \frac{\mu}{2\pi(1-\nu)}$ tandis que $K = \frac{\mu}{2\pi}$ pour une dislocation vis. Une structure équilibrée du coeur de la dislocation est obtenue lorsque la contrainte de cisaillement s'équilibre parfaitement avec une force de rappel du réseau cristallin. Cette force dérive d'un potentiel énergétique non convexe et périodique qui traduit la résistance du cristal au glissement. Initialement, le potentiel énergétique $\gamma(\eta(x))$ proposé par Peierls-Nabarro est une fonction sinusoïdale, de période b et de la forme :

$$\gamma(\eta(x)) = \frac{\mu b}{4\pi^2}(1 - \cos(\frac{2\pi\eta(x)}{b})) \tag{1.35}$$

La dérivée de $\gamma(\eta(x))$ par rapport à $\eta(x)$ conduit à l'expression de la force de rappel $T^R(x)$ dans le plan de cisaillement :

$$T^R(x) = \frac{\partial \gamma(\eta(x))}{\partial \eta(x)} = \frac{\mu}{2\pi} \sin(\frac{2\pi\eta(x)}{b}) \tag{1.36}$$

Quand la contrainte de rappel compense la contrainte de cisaillement, la structure de coeur de dislocation est en équilibre. Cet équilibre est caractérisé par l'équation

de Peierls-Nabarro [Peierls,1940, Nabarro,1947] :

$$\frac{K}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\alpha^s(x')}{x-x'}\,dx' + \frac{\mu}{2\pi}\sin(\frac{2\pi\eta(x)}{b}) = 0. \tag{1.37}$$

Pour un potentiel sinusoïdal, cette équation possède une solution analytique :

$$\eta(x) = \frac{b}{2} + \frac{b}{\pi}\arctan(\frac{2x\beta}{b}) \tag{1.38}$$

$\eta(x)$ représente l'étalement du coeur de la dislocation. Dans le cas d'une dislocation coin, $\beta = 1-\nu$ tandis que $\beta = 1$ pour une dislocation vis. Dans le cadre de la mécanique des champs de dislocations, nous pouvons dériver un modèle de type Peierls-Nabarro, mais évolutif dans le sens où la densité de dislocation peut se déformer et se déplacer dans le plan de glissement sous contrainte appliquée, par résolution de l'équation de transport. Dans le cadre d'un coeur de dislocation coin représenté par la densité α_{13}, les équations du modèle sont :

$$\eta_{12}(x_1) = \int_{-\infty}^{x_1}\alpha^s_{13}(x_1)\,dx_1, \tag{1.39}$$

$$\Psi = \psi(\boldsymbol{\varepsilon}^e) + \frac{\gamma_{12}}{d}. \tag{1.40}$$

Ψ est la densité d'énergie libre. En plus de la partie élastique habituelle, on ajoute le potentiel de Peierls $\gamma_{12} = \frac{\mu b}{4\pi^2}(1-\cos(\frac{2\pi\eta_{12}(x_1)}{b}))$. C'est une densité surfacique d'énergie (unité en J/m^2) localisée dans le plan de glissement. Elle est normalisée par la distance inter-planaire d afin d'obtenir une densité volumique (unité en $J/\,m^3$) cohérente avec la formulation du modèle. La densité de dislocation du modèle est $\alpha_{13} = \alpha^s_{13}/d$ et se déplace suivant x_1 à la vitesse V_1. La vitesse de distorsion plastique due au mouvement de la densité de dislocation s'écrit :

$$\dot{U}^p_{12} = \alpha_{13}\,V_1. \tag{1.41}$$

La dissipation lors du transport de la densité de dislocation coin s'écrit :

$$D = \int_V (T_{12}\,\dot{U}^p_{12} - \frac{1}{d}\,\frac{\partial\gamma_{12}}{\partial\eta_{12}}\,\dot{\eta_{12}})\,dv = \int_V (T_{12} + \frac{\partial\gamma_{12}}{\partial\eta_{12}})\,\dot{U}^p_{12}\,dv \tag{1.42}$$

T_{12} est la contrainte de cisaillement. Pour satisfaire la positivité de la dissipation, la vitesse des dislocations V_1 est prise sous la forme :

$$V_1 = \alpha_{13} \frac{(T_{12} + \frac{\partial \gamma_{12}}{\partial \eta_{12}})}{B^\alpha}, \tag{1.43}$$

où B^α est un coefficient de viscosité positif. L'équation de transport s'écrit finalement :

$$\dot{\alpha}_{13} = -(\alpha_{13} \frac{(T_{12} + \frac{\partial \gamma_{12}}{\partial \eta_{12}})\alpha_{13}}{B^\alpha})_{,1} \tag{1.44}$$

Les deux équations ci-dessus montrent clairement que la contrainte de cisaillement T_{12} qui contrôle le glissement des dislocations est maintenant compensée par une force de rappel $T_{12}^R = \frac{\partial \gamma_{12}}{\partial \eta_{12}}$. Le modèle est appliqué à l'auto-relaxation de deux distributions initiales de dislocations coins arbitraires. La première distribution présente un coeur compact, représenté par la courbe bleue sur la figure 1.6$-a$. La seconde dislocation a un coeur très diffus représenté par la courbe rouge sur la figure 1.6$-a$. En laissant les coeurs de dislocations s'auto-relaxer, nous observons l'étalement du coeur de la dislocation coin compacte. Cela se produit parce que la contrainte de cisaillement T_{12} est plus grande que la contrainte de rappel T_{12}^R. Inversement, la distribution diffuse devient compacte car la contrainte de cisaillement T_{12} est plus faible que la contrainte de rappel T_{12}^R. Après un temps de relaxation suffisant, à un stade où les contraintes de cisaillement et de rappel se compensent le long du plan de glissement, les deux distributions convergent vers la même structure de coeur d'équilibre représentée par la courbe noire sur la figure 1.6$-a$. L'équilibre est mis en évidence sur la figure 1.7$-b$ où les courbes de contrainte de cisaillement et de contrainte de rappel se compensent parfaitement. La structure du coeur de la dislocation planaire proposée par Peierls-Nabarro est une solution statique qui dérive de l'équation (1.38). Cette équation ne dit pas que cette solution peut être obtenue à travers un processus dynamique et dissipatif. Cependant, il est remarquable de noter que lors du processus de relaxation, le transport des deux densités de dislocations coins choisies arbitrairement conduit à la solution de Peierls-Nabarro. L'évolution dans le temps des énergies de cœur de ces deux dislocations est représentée sur la figure 1.6$-b$. Nous voyons que la solution de Peierls-Nabarro est bien une solution d'énergie minimale. Pour finir, le modèle a été étendu pour introduire des énergies de faute d'empilement généralisées, comme dans les modèles champs de phases, à la place du potentiel de Peierls [Gbemou,2016]. La figure 1.8 montre une énergie de faute d'empilement généralisée obtenue par Ab-initio dans le plan basal du zirconium, et la prédiction de la dissociation de dislocations coin et vis en partielles.

Chapitre 2

Mécanique des champs de désinclinaisons et de dislocations

2.1 Equations de champs

Nous présentons maintenant les équations essentielles de la mécanique des champs de désinclinaisons. Des analogies fortes existent avec la mécanique des champs de dislocations, notamment la décomposition de Stokes Helmholtz des courbures élastiques et plastiques, et l'équation de transport des densités de désinclinaisons. La présence de désinclinaisons introduit une discontinuité de rotation élastique (ou plastique, au signe près) du réseau cristallin, le vecteur de Frank $\mathbf{\Omega}$. Si le vecteur ligne d'une désinclinaison est parallèle au vecteur de Frank, la désinclinaison est de nature coin (wedge disclination en anglais). Si les deux vecteurs sont orthogonaux, la désinclinaison est de nature vis (twist en anglais). D'une façon similaire aux déplacements dans le cas des dislocations, les vecteurs de rotation élastique et plastique $(\vec{\boldsymbol{\omega}}^{\mathbf{e}}, \vec{\boldsymbol{\omega}}^{\mathbf{p}})$ ne sont plus des champs continus et les courbures élastiques $\boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}}$ et plastiques $\boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{p}}$ ne sont plus des tenseurs gradients compatibles. Ces tenseurs sont maintenant composés d'une partie compatible (gradient) et d'une nouvelle partie incompatible (rotationnelle). On définit le tenseur non nul $\boldsymbol{\theta}$ par :

$$\boldsymbol{\theta} = \mathbf{rot}\, \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}} = -\mathbf{rot}\, \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{p}} \tag{2.1}$$

$\boldsymbol{\theta}$ est le tenseur des densités de désinclinaisons introduit par deWit [deWit,1970]. Sa définition est semblable à celle du tenseur de Nye. Sa composante θ_{ij} est $\Omega_i t_j$ dans le repère cartésien $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$. Les composantes du tenseur de deWit portent un vecteur de Frank net Ω_i autour de $\mathbf{e}_i$ par unité de surface de résolution, pour un vecteur ligne de désinclinaison aligné suivant la direction $\mathbf{e}_j$, t_j. On remarque donc que les termes diagonaux du tenseur $\boldsymbol{\theta}$ représentent des désinclinaisons coins

et que les termes non diagonaux définissent des désinclinaisons vis. Si l'échelle de résolution spatiale est très faible, de l'ordre des distances interatomiques, alors une ligne de désinclinaison et son coeur seront décrits par une distribution spatiale de densité de désinclinaison, où chaque valeur locale de la densité représente une partie élémentaire du vecteur de Frank total de la ligne de désinclinaison. Cependant, à une échelle de résolution mésoscopique, la densité de désinclinaison traduira plutôt le vecteur de Frank résultant d'un ensemble polarisé de lignes de désinclinaisons. Comme dans le cas des dislocations, la décomposition de Stokes Helmholtz de $\boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}}$ et de $\boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{p}}$ est utilisée :

$$\boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}} = \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}\parallel} + \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}\perp}, \tag{2.2}$$

$$\boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{p}} = \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{p}\parallel} + \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{p}\perp}. \tag{2.3}$$

Une courbure plastique incompatible $\boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{p}\perp}$ est associée à la présence de la densité de désinclinaisons $\boldsymbol{\theta}$. La courbure élastique incompatible $\boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}\perp}$ est nécessaire pour assurer la compatibilité de la courbure totale, élastique plus plastique. Nous avons donc :

$$\boldsymbol{\theta} = \mathbf{rot}\ \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}\perp} = -\mathbf{rot}\ \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{p}\perp}; \quad \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}\perp} = -\boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{p}\perp}. \tag{2.4}$$

Pour s'assurer que les parties incompatibles $(\boldsymbol{\kappa}^{e\perp}, \boldsymbol{\kappa}^{p\perp})$ ne contiennent pas de partie gradient et disparaissent totalement lorsque $\boldsymbol{\theta} = \mathbf{0}$, elles doivent satisfaire les conditions supplémentaires :

$$\mathbf{div}\ \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}\perp} = \mathbf{div}\ \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{p}\perp} = \mathbf{0} \text{ dans } B; \quad \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}\perp} \cdot \mathbf{n} = \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{p}\perp} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \text{ sur } \partial B. \tag{2.5}$$

Comme cela a été montré précédemment pour les dislocations, la courbure élastique incompatible est donc solution de l'équation de type Poisson suivante :

$$\mathbf{div\ grad}\ \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}\perp} = \boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}\perp} = -\mathbf{rot}\ \boldsymbol{\theta} \text{ dans B}, \tag{2.6}$$

$$\boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}\perp} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \text{ sur } \partial\text{B}. \tag{2.7}$$

Le vecteur de Frank $\boldsymbol{\Omega}$ qui mesure la discontinuité de rotation élastique introduite par une distribution de désinclinaisons est obtenu en intégrant la courbure élastique incompatible le long du circuit fermé C délimitant une surface S de normale unitaire

$\mathbf{n}$ et contenant une densité de désinclinaison non nulle :

$$\boldsymbol{\Omega} = \int_C \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}\perp} \cdot \mathbf{dr} \tag{2.8}$$

Le théorème de Stokes appliqué à l'équation (2.8) permet d'écrire le vecteur de Frank comme :

$$\boldsymbol{\Omega} = \int_S \mathbf{rot}(\boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}\perp}) \cdot \mathbf{n}\, dS = \int_S \boldsymbol{\theta} \cdot \mathbf{n}\, dS. \tag{2.9}$$

Comme le tenseur de Nye, le tenseur $\boldsymbol{\theta}$ fournit une régularisation de la discontinuité de la rotation élastique. Cela permet de modéliser les structures de coeur des désinclinaisons avec des champs élastiques non-singuliers. Lorsque le circuit C englobe à la fois des lignes de dislocations et de désinclinaisons, comme les vecteurs rotations élastique et plastique $(\vec{\boldsymbol{\omega}}^e, \vec{\boldsymbol{\omega}}^p)$ sont discontinus à cause des désinclinaisons, les tenseurs de distorsions élastique $\mathbf{U^e}$ et plastique $\mathbf{U^p}$ sont alors indéfinis, et seules les déformations élastique et plastique peuvent être définies. les équations d'incompatibilités associées au tenseur de Nye doivent être formulées comme [deWit,1970] :

$$\mathbf{rot}\ \boldsymbol{\varepsilon}_\mathbf{p} = -\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\kappa}_\mathbf{p}^t - tr(\boldsymbol{\kappa}_\mathbf{p})\, \mathbf{I}, \tag{2.10}$$

$$\mathbf{rot}\ \boldsymbol{\varepsilon}_\mathbf{e} = \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\kappa}_\mathbf{e}^t - tr(\boldsymbol{\kappa}_\mathbf{e})\, \mathbf{I}. \tag{2.11}$$

L'équation (2.10) définit la déformation plastique incompatible associée au tenseur de densité de dislocation $\boldsymbol{\alpha}$ en présence simultanée d'une courbure plastique tandis que l'équation (2.11) détermine la déformation élastique incompatible nécessaire pour assurer la compatibilité de la déformation totale en présence de dislocations et de désinclinaisons. Les équations (2.1) et (2.11) ont été récemment utilisées pour estimer respectivement les tenseurs de densité de désinclinaison et de dislocation dans les matériaux cristallins à partir de cartes d'orientations obtenues par ESBD (les déformations élastiques étant souvent négligées) [Beausir,2013, Pantleon,2008]. Quelques résultats sont présentés sur la figure (2.1).

Comme nous considérons non seulement les déformations, mais aussi les courbures, nous devons maintenant considérer le tenseur des moments de contrainte $\mathbf{M}^{dev}$ en plus du tenseur symétrique des contraintes de Cauchy $\mathbf{T}^{sym}$. Le tenseur des moments de contrainte est pris déviatorique car la trace du tenseur des courbures matérielles est nulle, et les lois constitutives peuvent s'écrire sous la forme générale [Upadhyay,2013] :

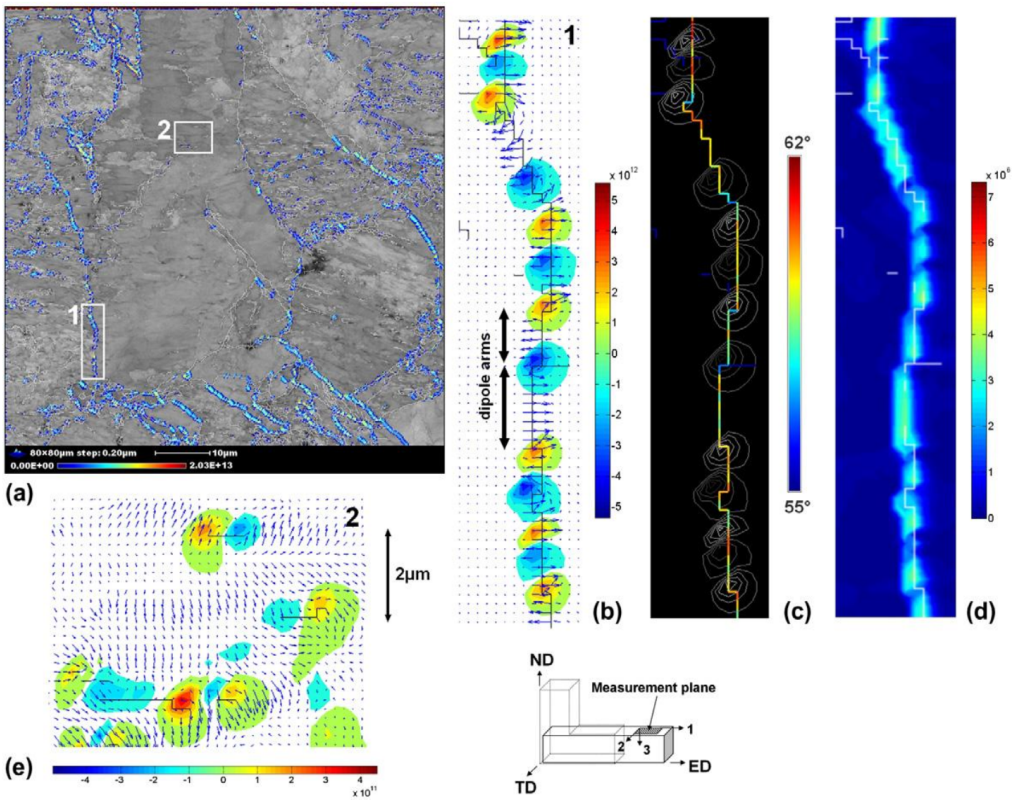


FIGURE 2.1 – Estimation des densités de dislocation et de désinclinaison à partir de cartes d'orientation obtenues par EBSD dans du cuivre pur déformé par ECAP [Beausir,2013]. (a) : Mesure scalaire de la densité de désinclinaison $\sqrt{\theta_{13}^2 + \theta_{23}^2 + \theta_{33}^2}$. (b) : Densité de désinclinaison coin θ_{33} le long d'un joint d'un grain. (c) : Variation de la désorientation tilt le long du joint de grain et correspondant aux désinclinaisons coins montrées sur (b). (d) : Mesure scalaire de la densité de dislocation $\sqrt{\alpha_{13}^2 + \alpha_{23}^2}$, l'orientation du vecteur de Burgers local associé à ces densités de dislocation est représentée par les flèches sur (b). (e) : Densité de désinclinaison coin θ_{33} le long de joints de grains de faibles désorientations.

$$\mathbf{T}^{\mathbf{sym}} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon}_e + \mathbf{D} : \boldsymbol{\kappa}_e \tag{2.12}$$
$$\mathbf{M}^{dev} = \mathbf{A} : \boldsymbol{\kappa}_e + \mathbf{B} : \boldsymbol{\epsilon}_e. \tag{2.13}$$

$\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$ et $\mathbf{D}$ sont des tenseurs d'élasticité. Alors que les modules C_{ijkl} et A_{ijkl} ont la dimension d'une contrainte et d'une contrainte multipliée par une longueur au carré, les modules B_{ijkl} and D_{ijkl} ont la dimension d'une contrainte multipliée par une longueur. Ainsi, les relations (2.12,2.13) impliquent des longueurs internes caractéristiques et ont un caractère non-local. En effet, le tenseur $\mathbf{D}$ induit des contraintes dues à une inhomogénéité de rotation sur une faible longueur, alors que le tenseur $\mathbf{B}$ induit des moments de contrainte dus à une inhomogénéité de déformation également sur une faible longueur. Dans le cadre de l'élasticité isotrope, homogène et linéaire, une forme pour ces tenseurs d'élasticité a été récemment proposée [Upadhyay,2013]. Un résultat important est que les tenseurs $\mathbf{B}$ et $\mathbf{D}$ sont nuls en faisant l'hypothèse de centrosymétrie. Ceci suggère que ces tenseurs sont non nuls au niveau du coeur des défauts cristallins, là où la centrosymétrie cristalline est rompue. Nous reviendrons sur ce point plus tard dans ce chapitre. En l'absence de forces de volumes et d'effets d'inerties, les équations d'équilibre mécanique sont :

$$\mathbf{div}\,\mathbf{T} = \mathbf{0} \tag{2.14}$$
$$\mathbf{div}\,\mathbf{M}^{dev} + 2\vec{\mathbf{T}} = \mathbf{0}. \tag{2.15}$$

Ce sont des équations d'équilibre très proches de celles des milieux de Cosserat. Le tenseur des contraintes $\mathbf{T}$ contient une partie symétrique $\mathbf{T}^{sym}$, le tenseur de Cauchy, et une partie anti-symétrique $\mathbf{T}^{skew}$. Cette dernière s'écrit également sous forme de vecteur $\vec{\mathbf{T}} = -1/2\mathbf{T} : \mathbf{X}$ et permet d'équilibrer les moments de contrainte. En se basant sur les travaux de Mindlin et Tiersten [Mindlin,1962], il est possible de satisfaire ces équations d'équilibre en résolvant l'équation d'ordre supérieur :

$$\mathbf{div}\,\mathbf{T} = \mathbf{div}\,\mathbf{T}^{sym} + \mathbf{div}\,\mathbf{T}^{skew} = \mathbf{div}\,\mathbf{T}^{sym} + \frac{1}{2}\mathbf{curl}\,\mathbf{div}\,\mathbf{M}^{dev} = \mathbf{0}, \tag{2.16}$$

Dans un problème purement élastique, elle s'écrit :

$$\mathbf{div}\,(\mathbf{C} : (\boldsymbol{\epsilon}_\mathbf{e}^{\parallel} + \boldsymbol{\epsilon}_\mathbf{e}^{\perp}) + \mathbf{D} : (\boldsymbol{\kappa}_\mathbf{e}^{\parallel} + \boldsymbol{\kappa}_\mathbf{e}^{\perp})) + \frac{1}{2}\mathbf{curl}\,\mathbf{div}\,(\mathbf{A} : (\boldsymbol{\kappa}_\mathbf{e}^{\parallel} + \boldsymbol{\kappa}_\mathbf{e}^{\perp}) + \mathbf{B} : (\boldsymbol{\epsilon}_\mathbf{e}^{\parallel} + \boldsymbol{\epsilon}_\mathbf{e}^{\perp})) = \mathbf{0}, \tag{2.17}$$

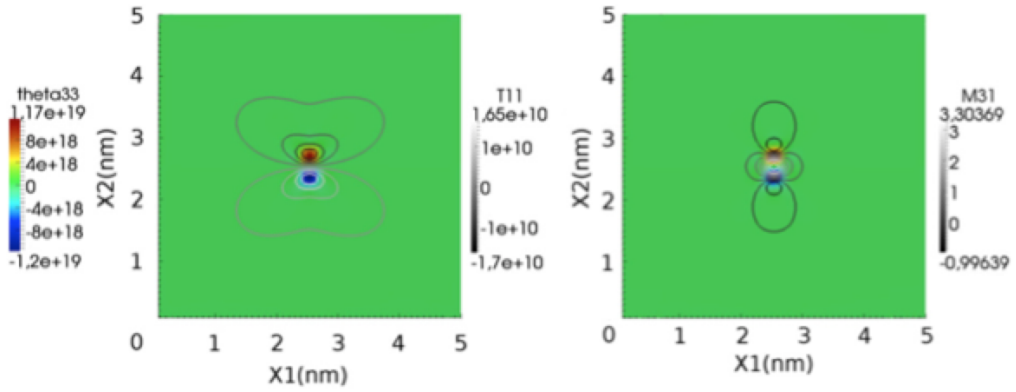


FIGURE 2.2 – Champs élastiques induits par un dipôle de désinclinaisons coins [Taupin,2013]. La densité de dislocation est nulle. Le dipôle est constitué de densités de désinclinaison coin θ_{33} négatives (bleu) et positives (rouge). Les contours en noir et blanc sur la figure de gauche montrent le champ de contrainte de traction/compression $T_{11}(Pa)$. Les contours en noir et blanc sur la figure de droite montrent le champ de moment de contrainte de flexion $M_{31}(Pa.m)$.

où l'inconnu est le vecteur déplacement qui intervient dans les déformations et dans les courbures élastiques compatibles, alors que les courbures et les déformations élastiques incompatibles proviennent d'une distribution de densités de dislocation $\boldsymbol{\alpha}$ et de désinclinaison $\boldsymbol{\theta}$ données. La figure (2.2) montre comme exemple le champ de contrainte de traction et de moment de contrainte d'un dipôle de désinclinaisons coins [Taupin,2013]. Nous retrouvons des champs de contraintes proches de ceux d'une dislocation coin équivalente. En revanche, les moments de contrainte sont différents car les courbures élastiques ne sont pas les mêmes [Upadhyay,2011].

L'équation de transport des densités de désinclinaisons exprime la conservation du vecteur de Frank au travers de surfaces élémentaires [Fressengeas,2011]. Elle prend une forme semblable à l'équation de transport des dislocations dans la mécanique des champs de dislocations :

$$\dot{\boldsymbol{\theta}} = -\mathbf{rot}\,(\boldsymbol{\theta} \times \mathbf{V}_\theta). \tag{2.18}$$

L'équation (2.18) est l'équation de transport des densités de désinclinaisons. Comparée avec la dérivée par rapport au temps de l'équation (2.1), on en déduit que :

$$\dot{\boldsymbol{\kappa}}_\mathbf{p} = \boldsymbol{\theta} \times \mathbf{V}_\theta. \tag{2.19}$$

$\dot{\boldsymbol{\kappa}}_{\mathbf{p}}$ est le tenseur des vitesses de courbure plastique engendré par le mouvement des densités de désinclinaisons. L'équation de transport des densités de dislocations s'écrit elle :

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = -\mathbf{rot}\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{p}} + \dot{\boldsymbol{\kappa}}_{\mathbf{p}}^{t} - tr(\ \dot{\boldsymbol{\kappa}}_{\mathbf{p}})\ \mathbf{I}, \tag{2.20}$$

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = -\mathbf{rot}\ (\frac{1}{2}\ (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{V}_{\alpha} + (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{V}_{\alpha})^{t})) + (\boldsymbol{\theta} \times \mathbf{V}_{\theta})^{t} - tr(\boldsymbol{\theta} \times \mathbf{V}_{\theta})\ \mathbf{I}. \tag{2.21}$$

L'équation 2.21 est de la forme :

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = -\mathbf{rot}\ \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathbf{p}} + \mathbf{S}_{\theta}. \tag{2.22}$$

L'équation (2.22) est l'équation de transport des densités de dislocations dans la théorie des champs de dislocations et de désinclinaisons [Fressengeas,2011]. L'équation (2.22) montre l'apparition d'un terme de source/puits de densités de dislocations $\mathbf{S}_{\theta}$ dû à la mobilité des désinclinaisons. Ainsi, le mouvement des désinclinaisons engendre une nucléation ou une annihilation de dislocations. Nous allons montrer plus loin dans ce chapitre l'importance de ce terme pour la modélisation des mécanismes de migration des joints de grains [Taupin,2014b]. Ce terme permet probablement aussi de modéliser la nucléation de dislocation depuis les joints de grains, ainsi que l'absorption des dislocations par les joints de grains. Ce terme de source/annihilation de dislocations a déjà été proposé pour expliquer la relaxation des champs de contraintes internes au voisinage des désinclinaisons [Romanov,1992, Kleman,2008]. En exprimant la puissance mécanique D dissipée lors de la production de courbures et déformations plastiques, des forces motrices agissant sur les densités de désinclinaisons et de dislocations peuvent être dérivées [Fressengeas,2011] :

$$\mathbf{F}_{\alpha} = \mathbf{T}^{sym}.\boldsymbol{\alpha} : \mathbf{X}; \quad F_{l}^{\alpha} = e_{jkl} T_{ij}^{sym} \alpha_{ik} \tag{2.23}$$

$$\mathbf{F}_{\theta} = \mathbf{M}^{dev,t}.\boldsymbol{\theta} : \mathbf{X}; \quad F_{l}^{\theta} = e_{jkl} M_{ij}^{dev} \theta_{ik} \tag{2.24}$$

$\mathbf{F}_{\alpha}$ and $\mathbf{F}_{\theta}$ sont les forces motrices agissant sur les densités de dislocations et de désinclinaisons. La force agissant sur les désinclinaisons est une force de type Peach-Koehler, à la différence majeure que ce sont les moments de contrainte et non les contraintes qui agissent sur les désinclinaisons. Pour satisfaire la positivité de la dissipation, nous proposons pour la vitesse des défauts le choix constitutif le plus simple :

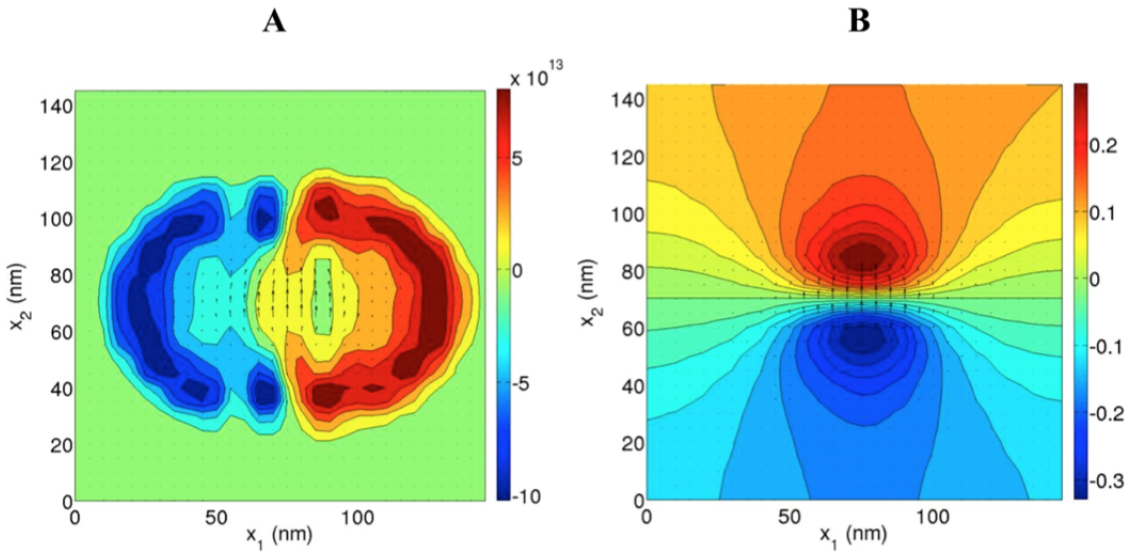


FIGURE 2.3 – (**A**) : Dipôle de désinclinaisons θ_{33} et distribution de densités de dislocations coins après auto-relaxation d'un dipôle initial compact. Le dipôle de désinclinaisons est en couleur et les flèches représentent les vecteurs de Burgers locaux associés aux densités de dislocations. (**B**) : Rotation ω_3 et champ de vecteur de Burgers. La rotation est en couleur et les flèches représentent le champ de vecteur de Burgers [Fressengeas,2011].

$$\mathbf{F}_\alpha = B_\alpha \mathbf{V}_\alpha; \quad B_\alpha > 0 \tag{2.25}$$
$$\mathbf{F}_\theta = B_\theta \mathbf{V}_\theta; \quad B_\theta > 0 \tag{2.26}$$

Les coefficients B_α et B_θ sont des paramètres matériau positifs. Pour terminer cette partie, nous présentons sur la figure 2.3 la toute première simulation de mécanique des champs de désinclinaisons et de dislocations, à l'aide d'un modèle bidimensionnel résolu par éléments finis [Fressengeas,2011]. Un dipôle de densités de désinclinaison coin θ_{33} initialement compact et placé au centre d'une boîte de simulation s'auto-relaxe et s'étale par transport sous son champ de moments de contrainte internes. Durant ce processus, des densités de dislocations coins sont nucléées et ces dernières sont contenues à l'intérieur du dipôle de désinclinaisons. Tout cet ensemble de défauts converge vers une structure organisée et d'énergie plus faible que la configuration initiale. Cette figure montre aussi que la relaxation par nucléation de dislocations génère un vecteur de Burgers perpendiculaire au bras du dipôle, ce qui donne un gradient de rotation élastique au travers du dipôle. Autrement dit, la relaxation du dipôle modifie localement la désorientation élastique pour relaxer les courbures élastiques.

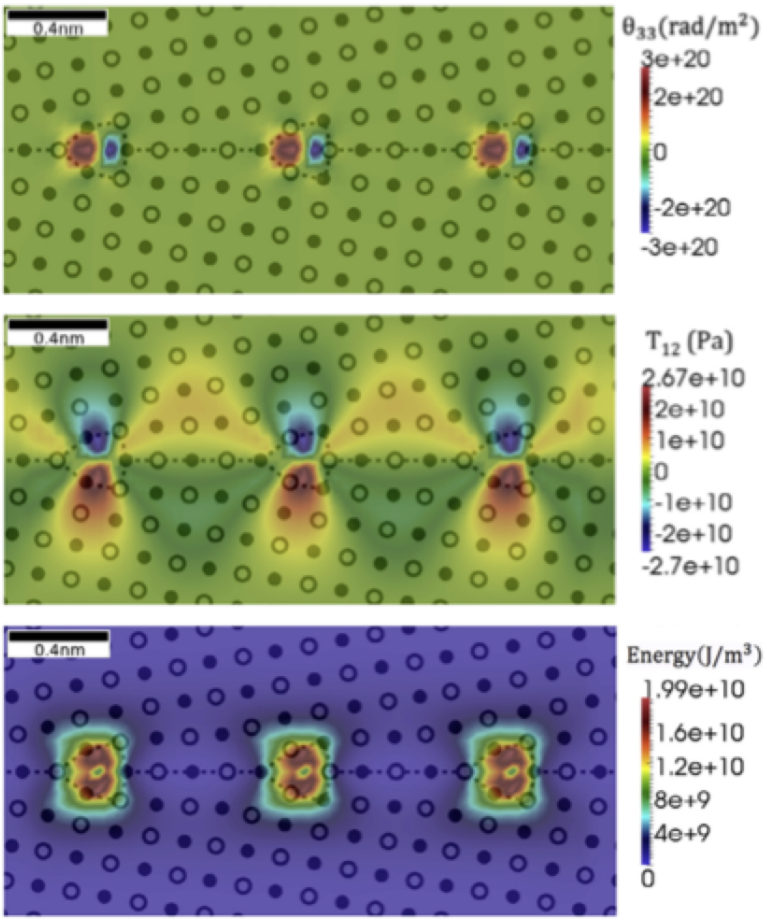


FIGURE 2.4 – En haut : dipôles de densités de désinclinaison coin au niveau des unités structurelles dans un joint de flexion $\sum 37\,(610) < 001 >$ de désorientation $18,9°$ dans un bicristal de cuivre. Au milieu : contrainte de cisaillement associée aux dipôles de désinclinaisons. En bas : Densité d'énergie élastique associée aux désinclinaisons [Fressengeas,2014].

2.2 Structure de coeur des joints de flexion

Le modèle bidimensionnel développé [Fressengeas,2011] a ensuite été appliqué aux joints de grains, à leur structure de coeur et à leur énergie d'excès [Taupin,2013, Fressengeas,2014]. Plus précisément, des joints de flexion symétriques de type $< 001 >$ dans le cuivre ont été considérés. Ils représentent des interfaces modèles simples pour une première étude et en vue de tester le potentiel prédictif du modèle. La figure 2.4 montre pour un joint de flexion donné la densité de désinclinaison coin et les champs de contrainte de cisaillement et de densité d'énergie associés [Fressengeas,2014]. Dans cette étude, les unités structurelles atomiques ont été modélisées par des dipôles de désinclinaisons coins. L'échelle de résolution spatiale est

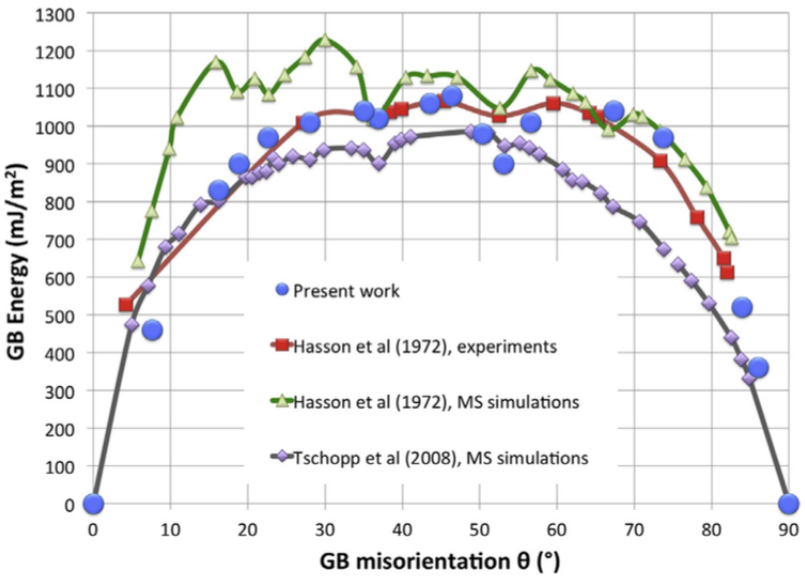


FIGURE 2.5 – Prédiction de l'énergie des joints de flexion symétriques de type $< 001 >$ dans le cuivre en fonction de la désorientation (points bleus), comparaison avec les données expérimentales [Hasson,1972] et des résultats de simulations atomistiques [Tschopp,2008a].

inférieure aux distances interatomiques, de sorte que nous sommes ici en train de modéliser les structures de coeur des joints de grains avec des étalements de densités de désinclinaison, par analogie aux dislocations et au modèle de Peierls-Nabarro. Les champs élastiques sont proches, qualitativement, à ceux observés expérimentalement [Hytch,1998, Hytch,2006, Couillard,2013]. On note que l'énergie est contenue dans une région de très faible épaisseur, inférieure au nanomètre, et que la majorité de l'énergie est contenue au niveau des unités structurelles. Enfin, la figure 2.5 montre la courbe de l'énergie d'excès des joints de flexion en fonction de la désorientation, en comparaison avec des résultats expérimentaux et numériques [Hasson,1972, Tschopp,2008a]. Nous sommes arrivés à prédire une évolution réaliste de l'énergie, avec même des cusps dus à des effets de screening élastique pour les fortes désorientations. Les valeurs locales des contraintes de traction et de cisaillement sont tout de même un peu élevées et suggèrent qu'une distribution un peu plus diffuse des coeurs de désinclinaisons serait plus adaptée, dans quel cas l'énergie des joints de flexion serait aussi plus faible. Ces résultats montrent globalement que le modèle de désinclinaisons permet de faire une transition d'une représentation atomique et discrète des structures de coeur des joints de flexion vers une représentation mécanique et continue, et qui reste relativement prédictive.

Le modèle a aussi été appliqué à des données expérimentales sur des couches mono-moléculaires de fullerènes [Nakamura,2011], déposées sur des substrats de

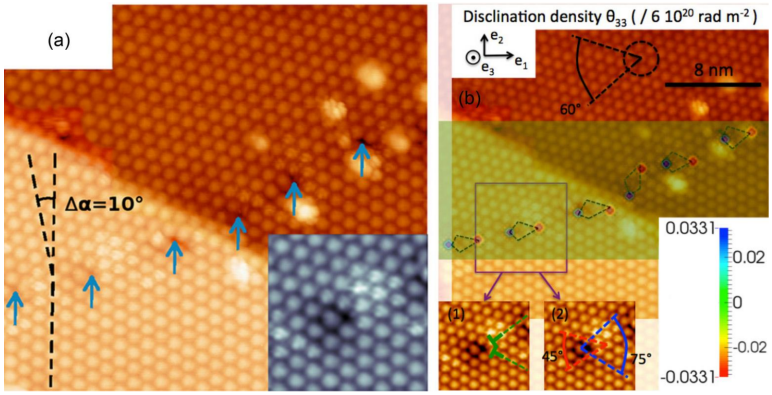


FIGURE 2.6 – (**a**) : Image d'un joint de flexion dans un film mono-moléculaire de fullerènes déposé sur un substrat de tungstène, observé par microscopie à effet tunnel [Bozhko,2014]. Chaque boule correspond à une molécule de fullerène C_{60}. La désorientation entre les deux régions est accommodée par un arrangement d'unités structurelles indiquées par les flèches bleues. Dans l'insert, les molécules qui brillent sont les molécules dont la rotation est interrompue et dont on peut deviner les orbitales électroniques par effet tunnel. (**b**) : Champ de densités de désinclinaison coin représentant les unités structurelles et superposé à la figure expérimentale. La mesure des vecteurs de Frank et une construction alternative avec des dislocations partielles sont montrées dans les deux inserts.

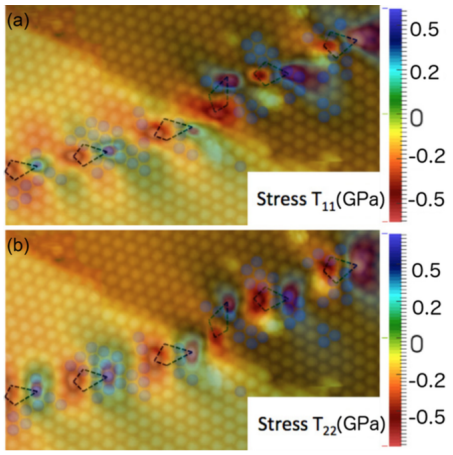


FIGURE 2.7 – Champs de contraintes de traction/compression dans le plan, dus à la distribution de désinclinaisons coins montrée sur la figure 2.6. On note que les zones en compression correspondent assez bien aux zones où la rotation des molécules de fullerènes est stoppée (boules bleues) [Bozhko,2014].

tungstène [Bozhko,2014]. Ce travail s'inscrit dans le cadre d'une collaboration avec l'Institut de Physique des Solides de l'Académie des Sciences de Russie. La figure 2.6 montre une telle couche de fullerènes, observée par microscopie à effet tunnel. La couche est face à nous et le substrat est en dessous. Chaque boule est une molécule de fullerène, composée de 60 atomes de carbone et ayant la forme d'un ballon de football. Une propriété surprenante est que ces molécules tournent sur elles-mêmes à une fréquence très élevée. Lors de la croissance de la couche sur le substrat, des régions d'orientations différentes par rapport au substrat se rejoignent, entraînant la formation de joints de flexion. Un tel joint de flexion est montré sur la figure 2.6.a. La désorientation est d'environ 10 degrés. On remarque que le joint est composé d'unités structurelles qui ressemblent beaucoup à celles observées dans les joints de flexion habituels, comme celui dans le cuivre montré précédemment. Cependant, il faut noter que ce sont ici des unités structurelles moléculaires. Par ailleurs, l'insert en noir et blanc dans la figure montre que certaines molécules au niveau des unités structurelles ne tournent plus et sont arrêtées. La microscopie à effet tunnel permet en effet de voir la structure orbitale électronique des molécules fixes qui semblent alors briller. Le modèle des désinclinaisons coins a été utilisé pour modéliser ce joint de flexion [Bozhko,2014], en utilisant des lois d'élasticité pour les fullerènes [Kobelev,2001]. La figure 2.6.b montre les dipôles de désinclinaisons utilisés pour modéliser les unités structurelles. La figure 2.7 montre les champs de contraintes de traction et compression dus aux désinclinaisons. Il est intéressant de noter que les ordres de grandeur obtenus sont en bon accord avec les estimations expérimentales et que les molécules de fullerènes qui sont fixes (boules bleues) sont essentiellement observées dans les régions en compression proches des unités structurelles. Comme le montre l'insert (2) dans la figure 2.6, une représentation à l'aide de densités de dislocations est aussi possible car les unités structurelles peuvent être vues comme deux dislocations partielles (une dans chaque grain). Cependant, les champs élastiques et les énergies associés sont trop élevés et la superposition des zones en compression avec les molécules fixes est beaucoup moins bonne. Les résultats obtenus semblent donc en faveur d'une description du joint de flexion en terme de désinclinaisons.

Pour terminer cette section, nous présentons très brièvement une méthode récente visant à estimer les densités de défauts (dislocations, désinclinaisons, et même les désinclinaisons généralisées discutées dans les perspectives de ce mémoire) à partir de simulations atomistiques de structures atomiques de défauts cristallins [Sun,2016]. Cette étude s'inscrit dans le cadre d'une collaboration avec le laboratoire UMET de Lille et du postdoctorat de Xiaoyu Sun. L'objectif est d'obtenir une estimation des densités de défauts dans des joints de grains plus généraux, plus complexes et pour d'autres matériaux, notamment les géomatériaux comme l'olivine. La méthode est la suivante. La configuration atomique relaxée est la configuration de référence. La configuration atomique initiale non relaxée est la configuration actuelle. Ces deux configurations sont montrées pour un joint de flexion symétrique dans le cuivre sur la figure 2.8. A partir de ces configurations, nous pouvons estimer les déplacements atomiques par une méthode différences finies [Sun,2016]. Nous

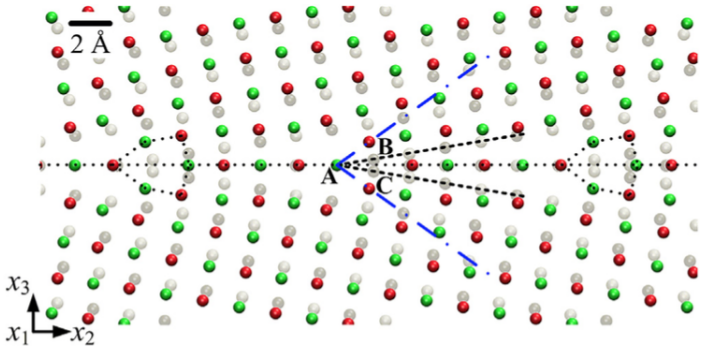


FIGURE 2.8 – Configurations atomiques de référence et actuelle utilisées pour la détermination des champs élastiques à partir des déplacements atomiques dans les joints de grains [Sun,2016].

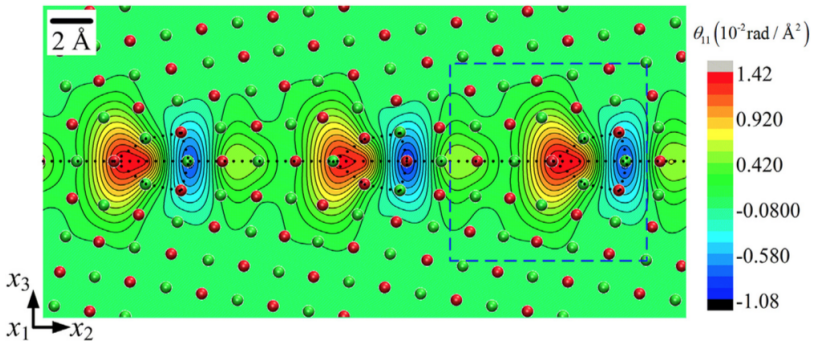


FIGURE 2.9 – Densités de désinclinaison coin estimées à partir des champs élastiques dérivés des déplacements atomiques dans un joint de flexion symétrique dans le cuivre, simulé par dynamique moléculaire [Sun,2016]. On note la présence de dipôles de désinclinaisons au niveau des unités structurelles.

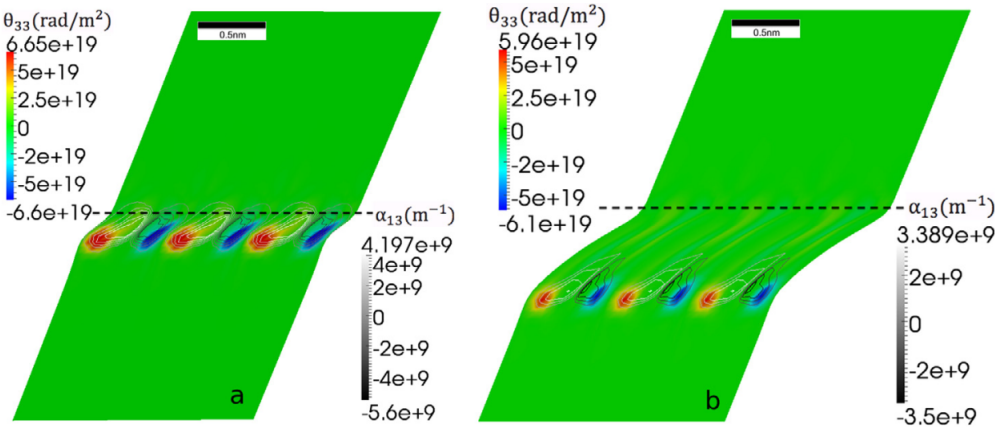


FIGURE 2.10 – (**a**, **b**) : Distribution de densités de désinclinaison coin θ_{33} (code couleur) et de densités de dislocation coin α_{13} (contours blancs et noirs) lors de la migration d'un joint de flexion de type $\sum 5\,(310) < 001 >$ de désorientation $36,87°$ dans du cuivre. Le trait en pointillés noirs indique la position initiale du joint de grain [Taupin,2014b].

pouvons ensuite calculer les dérivées spatiales et estimer les déformations et courbures élastiques, puis finalement les densités de désinclinaison et de dislocation. La méthode reste délicate dans le sens où il est nécessaire de faire attention à préserver des éventuelles discontinuités de déplacement et de rotation élastiques au niveau des interfaces, de façon à ne pas détruire les incompatibilités de déformation et de courbure et obtenir des densités de dislocation et de désinclinaison nulles. La figure 2.9 montre la densité de désinclinaison coin dans un joint de flexion symétrique de type $< 001 >$ dans le cuivre. On observe des dipôles au niveau des unités structurelles, très proches de ceux utilisés lors des premières simulations [Fressengeas,2014]. Des densités de dislocations coins sont également observées cependant, avec un vecteur de Burgers global perpendiculaire au joint de grain, consistent avec la nature du joint de grain [Sun,2016]. Il semble donc qu'une description du joint de flexion en termes de désinclinaisons et de dislocations soit nécessaire et plus réaliste.

2.3 Migration des joints de flexion sous cisaillement appliqué

Motivés par les résultats présentés ci-dessus, nous avons appliqué le modèle à la migration des joints de flexion sous cisaillement appliqué [Winning,2001, Taupin,2014b]. Les figures 2.10 et 2.11 montrent la simulation de la migration d'un joint de flexion

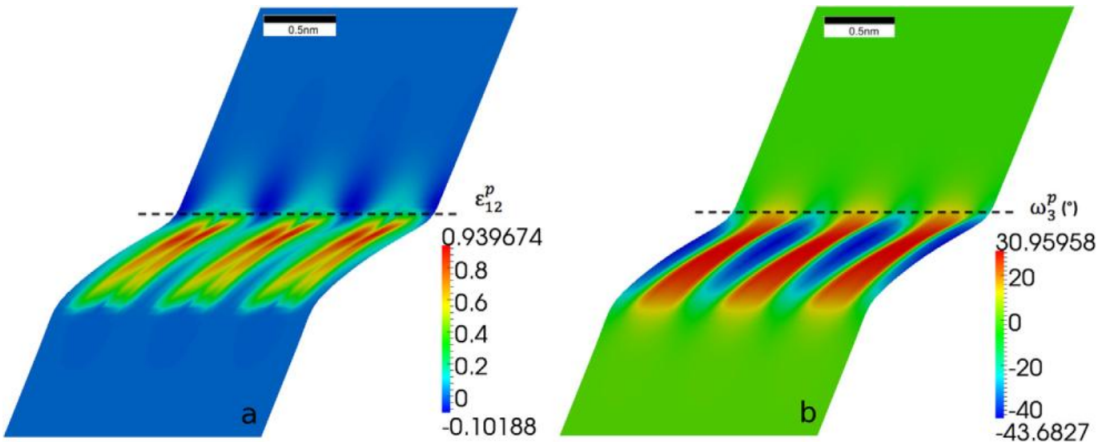


FIGURE 2.11 – $(\mathbf{a}, \mathbf{b})$: Déformation plastique ε_{12}^p et rotation plastique ω_3^p dues à la migration du joint de grain montrée sur la figure 2.10. Le trait en pointillés noirs indique la position initiale du joint de grain [Taupin,2014b].

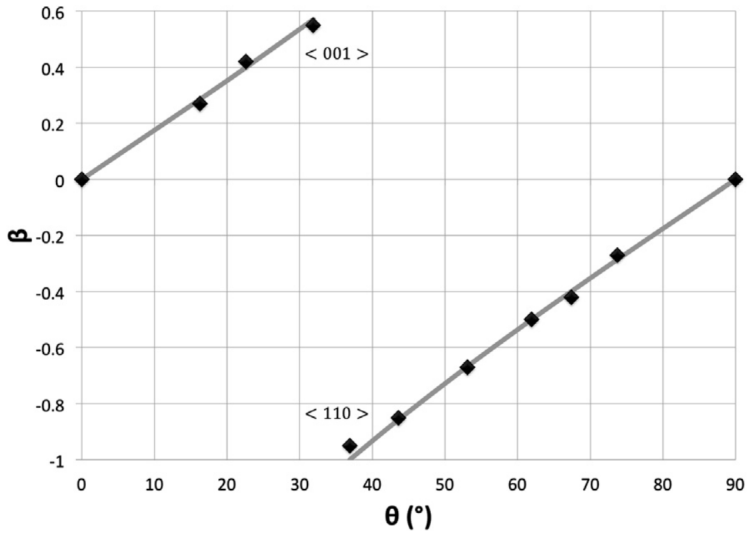


FIGURE 2.12 – Prédiction du facteur de cisaillement des joints de flexion symétriques de type $< 001 >$ dans le cuivre en fonction de la désorientation (losanges) [Taupin,2014b], comparaison avec les données expérimentales [Gorkaya,2009] et les simulations atomistiques [Cahn,2006] (lignes).

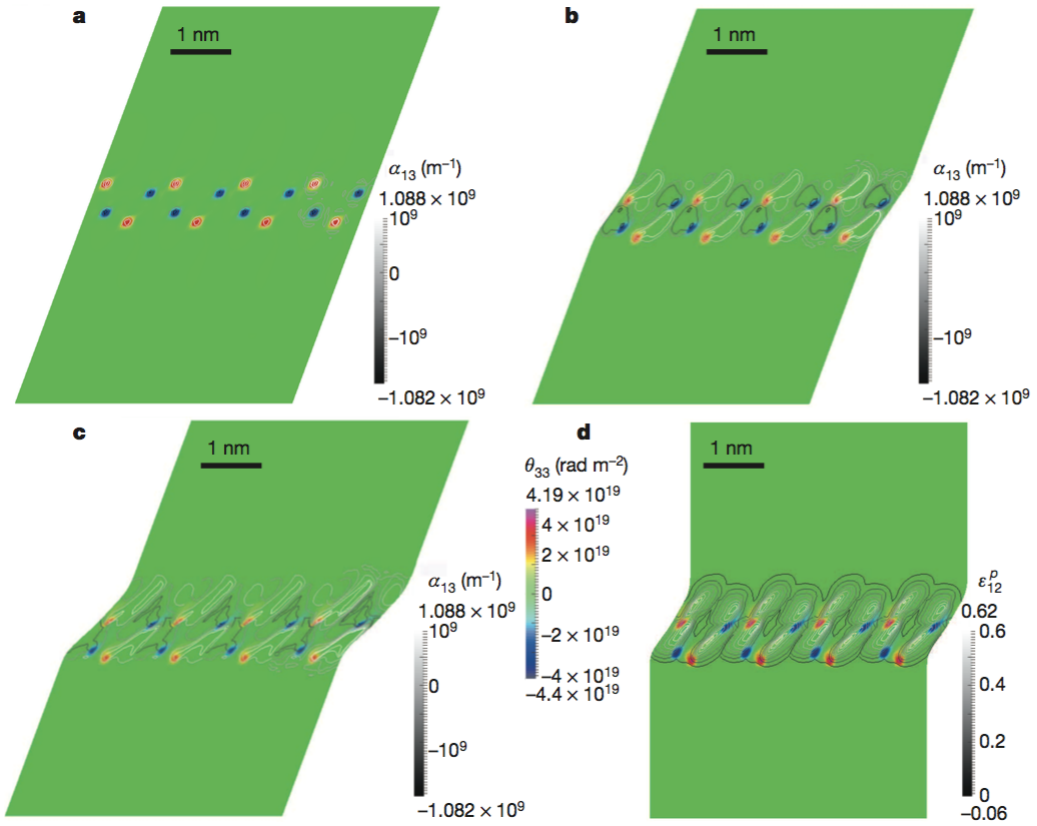


FIGURE 2.13 – Modélisation de la migration d'un joint de flexion dans l'olivine [Cordier,2014]. Les figures (a,b,c,d) montrent la migration progressive du joint de grain et le cisaillement plastique produit.

symétrique $\sum 5\ (310) < 001 >$ de désorientation $36,87°$ dans un bicristal de cuivre. Lorsqu'une déformation de cisaillement est appliquée au bicristal, des moments de contrainte sont générés au travers des lois d'élasticité [Upadhyay,2013] et ces derniers mettent en mouvement les densités de désinclinaison perpendiculairement au joint de grain. Du mouvement des désinclinaisons résulte une nucléation de dipôles de densités de dislocations coins dont le vecteur de Burgers partiel résultant est horizontal. Le champ de contrainte de cisaillement entraîne quasi-immédiatement le mouvement de ces dipôles de dislocations parallèlement au joint de grain et ces dernières s'annihilent à mi distance en produisant de la déformation de cisaillement plastique entre le dipôle. Comme illustré sur la figure 2.10, durant ce mécanisme continu d'émission, de glissement et d'annihilation de dislocations qui suit le mouvement des désinclinaisons, la structure des dipôles de désinclinaisons est préservée et continue son déplacement. Comme le montre la figure 2.11, un champ de déformation de cisaillement plastique est induit par le mouvement des dislocations coins nucléées, alors qu'un champ de rotation plastique ω_3^p dérive du mouvement des dipôles de désinclinaisons. Cette décomposition du cisaillement plastique en déformation et en rotation est analogue à celle proposée dans le cadre des disconnections [Cahn,2006, Khater,2012] . Des comparaisons surprenantes sont aussi observées avec des résultats à l'échelle atomique entre les champs de déformations et de rotations produits par la migration des joints de flexion [Zimmerman,2009, Tucker,2012]. Il est important de noter que sans les tenseurs d'élasticité non-locaux $\mathbf{B}$ et $\mathbf{D}$, la migration des joints de flexion ne peut pas être obtenue car aucun moment de contrainte n'est alors généré par l'application d'une déformation de cisaillement. La figure 2.12 montre finalement la prédiction du facteur de cisaillement (shear coupling factor, ratio entre la translation des grains due au cisaillement et la distance parcourue par le joint de grain) en fonction de la désorientation, en comparaison avec les résultats expérimentaux [Gorkaya,2009] et les simulations atomistiques [Cahn,2006]. Le modèle permet de reproduire l'évolution du facteur de cisaillement et notamment les deux branches positive et négative, reliées à la polarité des dipôles de désinclinaisons, qui change en fonction de la désorientation [Taupin,2014b].

Le modèle développé pour la migration des joints de grains a récemment été appliqué à l'olivine [Cordier,2014]. L'olivine est un constituant du manteau terrestre qui manque de systèmes de glissement de dislocations pour pouvoir accommoder la déformation du manteau. Ainsi, d'autres mécanismes de déformation plastique doivent exister. Le glissement des joints de grains (grain boundary sliding) est un mécanisme possible. Dans cette étude, nous avons proposé que la migration des joints de grains est aussi un mécanisme possible. Tout d'abord, la présence de désinclinaisons dans l'olivine a été mise en évidence en se basant sur des cartes d'orientation cristalline obtenues par EBSD. Ensuite, un joint de flexion simulé par dynamique moléculaire a été modélisé par des densités de désinclinaison coin. Ces dernières se trouvent sous la forme de quadripôles pour ce joint de flexion particulier. La figure 2.13 montre ce joint de grain et son évolution sous cisaillement appliqué. Un mécanisme similaire à celui observé dans le cuivre et détaillé ci-dessus [Taupin,2014b] opère. La migration

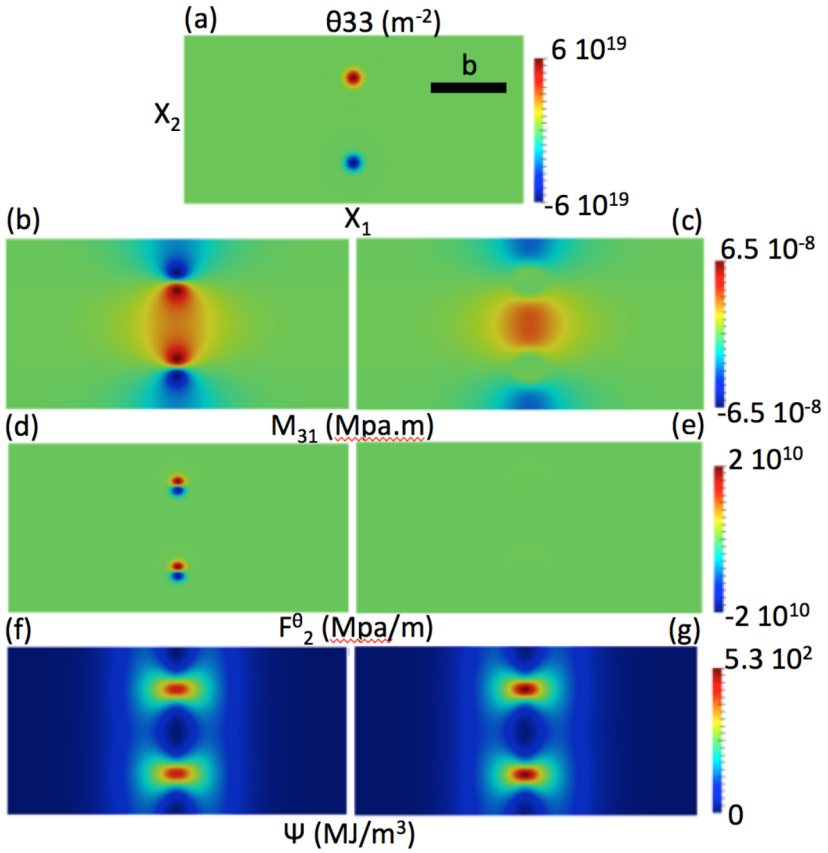


FIGURE 2.14 – Dipôle de désinclinaisons coins θ_{33}. (**a**) : Champ de densité de désinclinaison coin. (**b**, **c**) : Champ de moment de contrainte en élasticité locale (**b**) et en élasticité non locale (**c**). (**d**, **e**) : Force motrice agissant sur la densité de désinclinaison coin en élasticité locale (**d**) et en élasticité non locale (**e**). (**f**, **g**) : Champ de densité d'énergie en élasticité locale (**f**) et en élasticité non locale (**g**). La même échelle de couleur est utilisée pour la comparaison des champs en élasticité locale et non locale [Taupin,2017].

du joint de flexion produit une déformation plastique de cisaillement importante. Ce résultat suggère donc que les joints de grains peuvent contribuer au manque de plasticité par les dislocations dans le manteau terrestre [Cordier,2014].

2.4 Elasticité non locale

Cette étude fait l'objet de la thèse de doctorat de Kodjovi Gbémou [Taupin,2017]. Dans la modélisation conventionnelle des matériaux cristallins, les lois de comportement élastique constitutives établissent une relation entre les déformations élas-

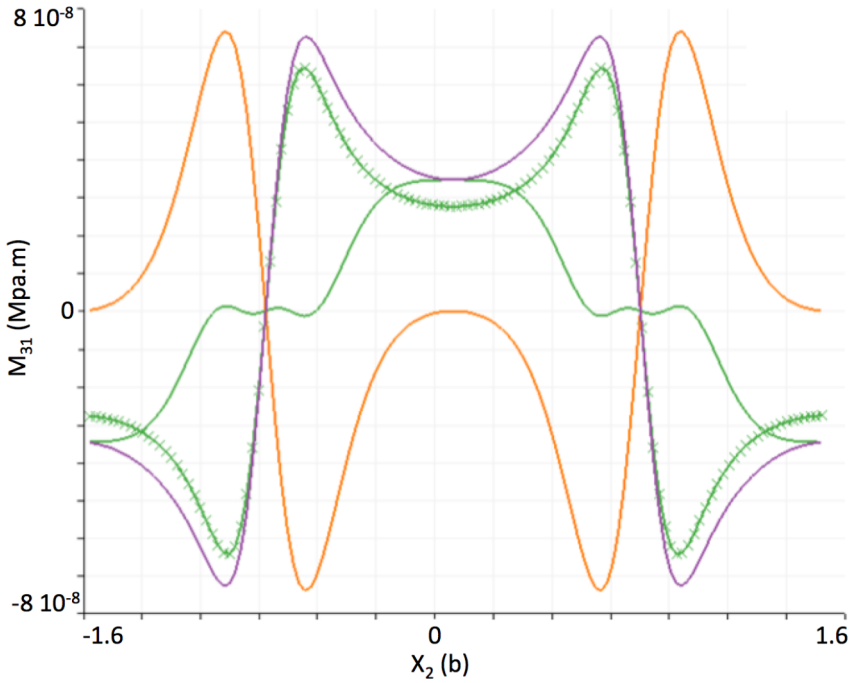


FIGURE 2.15 – Dipôle de désinclinaisons coins θ_{33}. Profils du champ moment de contrainte représenté sur la figure 2.14 le long de la ligne verticale traversant le dipôle de désinclinaisons. La ligne verte avec les croix représente le moment de contrainte total en utilisant l'élasticité locale. La ligne verte indique le moment de contrainte total en utilisant l'élasticité non locale, c'est à dire la somme du moment de contrainte local (ligne violette) et du moment de contrainte non local (ligne orange) [Taupin,2017].

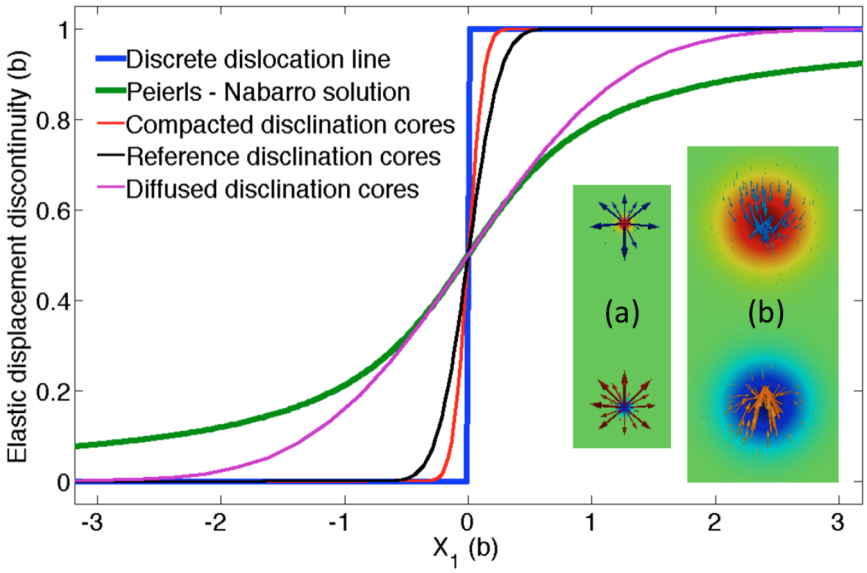


FIGURE 2.16 – Profils des discontinuités de déplacement élastique (misfit) pour le dipôle de désinclinaisons coins θ_{33} suivant la ligne médiane horizontale, pour différents étalements des coeurs de désinclinaisons. La courbe bleue montre la discontinuité pour une dislocation discrète, la courbe verte la discontinuité dans le modèle de Peierls-Nabarro [Taupin,2017].

tiques et les contraintes. La plupart de ces relations sont locales, ce qui signifie qu'elles lient les contraintes en un point donné du matériau aux déformations au même point. Les relations constitutives locales sont valides lorsque l'échelle de résolution choisie, c'est à dire la taille caractéristique du point matériel considéré, est assez grande pour s'assurer que ce dernier contient un grand nombre d'atomes et possiblement de défauts cristallins. Dans ce cas, les lois constitutives caractérisent le comportement moyen de l'ensemble des atomes qui composent les volumes élémentaires. Les lois d'élasticité locales peuvent cependant devenir inadéquates lorsque l'échelle de résolution est réduite à l'échelle atomique, en raison des interactions atomiques complexes et non locales. Eringen a montré que les lois constitutives locales ne peuvent pas rendre compte proprement du comportement élastique à cette échelle [Eringen,1966, Eringen,1972, Eringen,1977a, Eringen,1977b, Eringen,2002]. Des lois élastiques non locales ont été proposées, qui utilisent des intégrales de convolution dans lesquelles les contraintes à un point donné du matériau dépendent des déformations élastiques aux points voisins, la portée des interactions étant contrôlée par un noyau non local [Eringen,2002]. Ces formulations ont trouvé plusieurs domaines d'application [Di Paola,2013]. Dans un premier temps, à l'échelle interatomique, elles ont permis de retrouver les relations de dispersion des phonons et la dimension de l'élasticité non locale trouvée s'avère être de l'ordre des distances interatomiques [Eringen,1977a]. Ensuite, elles ont permis la régularisation des champs élastiques des lignes de dislocations discrètes, de fissures et de désinclinaisons [Eringen,1977b, Eringen,2002, Lazar,2011]. Une régularisation peut aussi

être obtenue en utilisant des moments de contrainte pour décrire les champs mécaniques et par conséquent en introduisant des relations constitutives d'ordre supérieur [Lazar,2003, Po,2014, Seif,2014, Lazar,2015]. Comme les moments de contrainte en un point donné du matériau symbolisent les forces mécaniques appliquées à des points distants, de telles approches sont équivalentes à introduire des échelles de longueur internes dans la formulation constitutive, tout comme les intégrales de convolution.

Dans cette section, nous souhaitons montrer que les intégrales de convolution proposées par Eringen peuvent aussi être utilisées pour dériver des lois constitutives élastiques non locales qui ont une pleine signification dans les parties du matériau où les dislocations et les désinclinaisons sont présentes [Taupin,2017]. Nous avons montré, dans le cadre de l'élasticité linéaire isotrope [Upadhyay,2013], qu'en plus des tenseurs élastiques reliant les contraintes aux déformations et les moments de contrainte aux courbures, ils existent des tenseurs élastiques qui relient les contraintes aux courbures et les moments de contrainte aux déformations. Nous avons suggéré que ces tenseurs sont nuls dans des conditions de centro-symétrie, mais non nuls si nous assumons que la centro-symétrie est rompue en présence de défauts cristallins. Ces tenseurs semblent donc devoir être associés à un comportement élastique spécifique aux défauts cristallins. Beaucoup d'études dans la littérature ont déjà montré que les défauts cristallins ont une élasticité spécifique, par exemple les joints de grains et les hétéro-interfaces [Spearot,2007, Spearot,2008, Tschopp,2008a, Tschopp,2008b, Tschopp,2008c, Dingreville,2014]. En se basant sur [Upadhyay,2013] et en s'appuyant sur des fonctionnelles de densité d'énergie élastique non locale de type Eringen pour les déformations et les courbures, nous avons donc dérivé des tenseurs d'élasticité non locale qui existent dans les régions du cristal contenant des défauts et qui s'annulent dans les régions parfaites. Une formulation générale de ces tenseurs élastiques non-locaux a été proposée et des expressions simplifiées dérivées pour analyser leurs effets sur plusieurs configurations élasto-statiques de dislocations et de désinclinaisons. Nous supposons une fonctionnelle de densité d'énergie élastique en tout point $\mathbf{r}$ du domaine V sous la forme intégrale suivante :

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2}C_{ijkl}(\mathbf{r})\epsilon^e_{ij}(\mathbf{r})\epsilon^e_{kl}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}A_{ijkl}(\mathbf{r})\kappa^e_{ij}(\mathbf{r})\kappa^e_{kl}(\mathbf{r}) + ... \\ ... &+ \frac{1}{2}\epsilon^e_{ij}(\mathbf{r})\int_V D_{ijkl}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\epsilon^e_{kl}(\mathbf{r}')dV' + ... \\ ... &+ \frac{1}{2}\kappa^e_{ij}(\mathbf{r})\int_V B_{ijkl}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\kappa^e_{kl}(\mathbf{r}')dV'. \end{aligned} \tag{2.27}$$

Les deux premiers termes à droite dans l'équation 2.27 impliquent des formes quadratiques symétriques définies positives $\mathbf{A}$ et $\mathbf{C}$ données au point $\mathbf{r}$. Elles conduisent à des lois élastiques constitutives linéaires utilisées et discutées par [deWit,1970, Fressengeas,2011, Upadhyay,2013] dans le cadre des modèles de champs de disloca-

tions et de désinclinaisons. La non linéarité de l'élasticité peut jouer un rôle dans les régions de cœur des défauts mais elle ne sera pas considérée ici. La nouveauté dans ce travail est l'introduction des contributions non locales dans les équations constitutives. Ces contributions qui apparaissent dans les deux derniers termes à droite dans l'équation 2.27 sont prises sous la forme d'intégrales de convolution de type Eringen. Dans ces intégrales de convolution, $\mathbf{r}'$ dénote un point du matériau distant de la position $\mathbf{r}$. Nous définissons également le vecteur $\mathbf{R}' = (\mathbf{r}' - \mathbf{r})$. Les amplitudes de $\mathbf{B}$ et $\mathbf{D}$ doivent décroître rapidement et atteindre une valeur nulle lorsque la distance relative $\mathbf{R}'$ augmente [Eringen,2002]. Le détail des calculs est fourni dans la référence [Taupin,2017]. Les lois d'élasticité obtenues s'écrivent :

$$T_{ij}^{sym} = \frac{\partial \psi}{\partial \epsilon_{ij}^e} = C_{ijkl}\epsilon_{kl}^e + \overline{D}_{ijkl}\kappa_{kl}^e \tag{2.28}$$

$$M_{ij}^{dev} = \frac{\partial \psi}{\partial \kappa_{ij}^e} = A_{ijkl}\kappa_{kl}^e + \overline{D}_{klij}\epsilon_{kl}^e. \tag{2.29}$$

Elles expriment les contraintes et les moments de contrainte en un point matériel donné, en fonction des déformations et des courbures élastiques au même point. La non-localité est incluse dans le tenseur non-local $\bar{\mathbf{D}}$. Les composantes de ce tenseur sont de la forme :

$$\overline{D}_{ijml}(\mathbf{r}) = -e_{kmn}\int_V \mathcal{K}(\mathbf{R}')\frac{||\boldsymbol{\eta}(\mathbf{r}')||}{\eta_0}R'_n dV'\, C_{ijkl} = -e_{kmn}\, l_n(\mathbf{r})C_{ijkl}. \tag{2.30}$$

Dans cette équation, le terme $l_n(\mathbf{r}) = \int_V \mathcal{K}(\mathbf{R}')\frac{||\boldsymbol{\eta}(\mathbf{r}')||}{\eta_0}R'_n dV'$ est une longueur qui définit la portée de la non localité des modules élastiques suivant la direction $\mathbf{e_n}$. Nous avons montré que cette longueur doit rester plus faible que la longueur interne contenue dans le tenseur $\mathbf{A}$ (de la forme $\mu\, l^2$ où μ est le module de cisaillement et l la longueur interne) pour assurer la stabilité élastique [Taupin,2017]. Les résultats présentés ci-dessous ont été obtenus à l'aide de méthodes numériques spectrales utilisant les algorithmes de transformées de Fourier rapides (FFT), dont la présentation fait l'objet du prochain chapitre. Parmi les résultats obtenus [Taupin,2017], nous présentons ici un problème semblable au modèle de Peierls Nabarro, revisité en termes de désinclinaisons, de moments de contrainte et d'élasticité non locale. Nous considérons des désinclinaisons coins dont la ligne et le vecteur de Frank sont parallèles à la direction $\mathbf{e_3}$. Ces désinclinaisons sont prises en compte à travers la densité θ_{33}. Le matériau considéré ici est le cuivre. La taille de voxel dans la grille FFT est $\delta = 0.0025\, b$, où b est la norme du vecteur de Burgers. Cette résolution est suffisamment petite pour assurer une bonne description continue des champs élastiques dans la région de cœur des défauts. Les cœurs de désinclinaisons sont in-

troduits dans la grille en utilisant des distributions Gaussiennes. Dans ce qui suit, le tenseur des contraintes $\mathbf{C} : \boldsymbol{\epsilon}^{\mathbf{e}}$ sera dénommé "contrainte locale", $\overline{\mathbf{D}} : \boldsymbol{\kappa}^{e}$ " contrainte non locale", le moment de contrainte $\mathbf{A} : \boldsymbol{\kappa}^{\mathbf{e}}$ "moment de contrainte local" et $\overline{\mathbf{D}}^{t} : \boldsymbol{\epsilon}^{e}$ "moment de contrainte non local". Nous considérons un dipôle de désinclinaisons coins θ_{33} "équivalent" à une dislocation coin, ayant une petite longueur de bras de dipôle. Le terme "équivalent" signifie que le vecteur de Burgers du dipôle est le même que celui d'une dislocation coin et que le champ de contrainte de premier ordre coïncide presque avec celui d'une dislocation coin. Sur les figures 2.14 et 2.15, nous regardons les effets de la non localité sur les champs de moments de contrainte du dipôle de désinclinaisons coins θ_{33}. La figure 2.14 compare les champs obtenus dans le cas de l'élasticité locale (colonne de gauche) à ceux obtenus en utilisant l'élasticité non-locale (colonne de droite). Sur les figures 2.14-($\mathbf{b}$, $\mathbf{c}$) sont illustrés les champs de moment de contrainte M_{31}. Dans le cas de l'élasticité locale, les résultats antérieurs [Taupin,2013] sont retrouvés. Nous observons que le moment de contrainte non local joue le rôle de moment de contrainte de rappel, par analogie au modèle de Peierls-Nabarro. Comme le montre assez clairement la figure 2.15, ce moment non-local au niveau du coeur des désinclinaisons est capable d'annuler le moment de contrainte totale, local plus non local, de sorte que les coeurs de désinclinaisons sont en équilibre. Nous avons en effet vérifié récemment en résolvant numériquement les equations de transport que les coeurs de désinclinaisons atteignent une configuration en équilibre. Les champs de contraintes internes eux sont peu affectés par la non localité et restent très proche de la solution habituelle. Cette propriété implique qu'une configuration stable et équilibrée peut être obtenue pour les densités de défauts, pour laquelle aucun étalement infini ne se produit. Les profils des discontinuités de déplacement élastique (misfit) obtenus dans cette configuration de référence et dans deux autres configurations (l'une plus diffuse et l'autre plus compacte) sont représentés sur la figure 2.16, et ces derniers sont comparés au profil de la discontinuité pour une dislocation discrète et au profil de Peierls-Nabarro.

Chapitre 3

Méthodes numériques spectrales

3.1 Statique des champs de dislocations

Dans cette première partie, nous présentons le développement de méthodes numériques spectrales, utilisant les algorithmes de transformées de Fourier rapides (FFT), dédiées aux calculs des champs de contraintes internes associés à des distributions de densités de dislocation dans des matériaux élastiquement homogènes [Berbenni,2014], puis hétérogènes [Djaka,2017]. Ces travaux s'inscrivent dans le cadre de la thèse de Konlam Sénam Djaka. Ces travaux sont motivés par l'efficacité des schémas numériques existants pour les matériaux élastiques hétérogènes et le but est de rendre accessible la mécanique des champs de dislocations aux calculs de microstructures tridimensionnelles réalistes. La nouveauté apportée dans cette étude est notamment le calcul et l'introduction des distorsions élastiques incompatibles dues aux densités de dislocation dans l'équation d'équilibre, ainsi qu'un traitement particulier du calcul des dérivées spatiales dans le l'espace de Fourier pour assurer une stabilité et une bonne précision numérique. Nous commençons par le cas de l'élasticité homogène. En l'absence de forces de volume et d'inertie, nous supposons une contrainte macroscopique appliquée $\overline{\mathbf{T}}$ (conditions aux limites en contraintes), qui est la contrainte moyenne $\langle \mathbf{T} \rangle$ sur la cellule unitaire périodique de volume V. Nous considérons aussi une densité de dislocation $\boldsymbol{\alpha}$ donnée et induisant des contraintes internes à calculer. Nous rappelons les équations à résoudre successivement (pour un domaine fini et non périodique) :

$$\mathbf{div\,grad}\,\mathbf{U}^{\mathbf{e}\perp} = \boldsymbol{\Delta}\mathbf{U}^{\mathbf{e}\perp} = -\mathbf{rot}\,\boldsymbol{\alpha} \text{ dans } V, \tag{3.1}$$

$$\mathbf{U}^{\mathbf{e}\perp} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \text{ sur } \partial V, \tag{3.2}$$

$$\mathbf{div}\left(\mathbf{C} : \mathbf{U}^{e,\parallel}\right) + \mathbf{f}^{\perp} = \mathbf{0}, \tag{3.3}$$

avec $\mathbf{f}^{\perp} = \mathbf{div}\,(\mathbf{C} : \mathbf{U}_e^{\perp})$ et $\mathbf{U}^{e,\parallel} = \mathbf{grad}\,\mathbf{w}$. Dans l'espace de Fourier, notons par $\boldsymbol{\xi}$ le vecteur de Fourier d'amplitude $\xi = \sqrt{\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{\xi}}$ et de composantes ξ_i dans un repère Cartésien tridimensionnel. Le nombre complexe imaginaire dénoté i est défini comme $\mathrm{i} = \sqrt{-1}$. Soient $\widetilde{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi})$ et $\widetilde{\mathbf{U}}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi})$ les transformées de Fourier respectives de $\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{x})$ et $\mathbf{U}^{e,\perp}(\boldsymbol{x})$. L'équation de type Poisson (équation 3.1) (en notation indicielle) avec les conditions aux limites (équation 3.2) sont résolues dans l'espace de Fourier :

$$\begin{aligned} &\widetilde{U}_{ij}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\mathrm{i}}{\xi^2}\xi_k\left(e_{jkl}\widetilde{\alpha}_{il}(\boldsymbol{\xi})\right)\ \ \forall\boldsymbol{\xi}\neq\mathbf{0} \\ &\widetilde{U}_{ij}^{e,\perp}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Les conditions aux limites sur les distorsions incompatibles ci-dessus (valeur moyenne nulle) sont différentes des conditions 3.2 du fait des conditions aux limites périodiques. Soient $\widetilde{\mathbf{w}}(\boldsymbol{\xi})$ et $\widetilde{\mathbf{U}}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi})$ les transformées de Fourier respectives de $\mathbf{w}(\boldsymbol{x})$ et $\mathbf{U}^{e,\parallel}(\boldsymbol{x})$. L'équation de type Navier en élasticité homogène (équation 3.3) s'écrit dans l'espace de Fourier sous la forme :

$$C_{ijkl}\xi_l\xi_j\widetilde{w}_k(\boldsymbol{\xi}) = C_{ijkl}i\xi_j\widetilde{U}_{kl}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}), \tag{3.5}$$

où la distortion élastique compatible $\widetilde{U}_{ij}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi}) = \mathrm{i}\xi_j\widetilde{w}_i(\boldsymbol{\xi})$. Ainsi, $\widetilde{\mathbf{w}}(\boldsymbol{\xi})$ et $\widetilde{\mathbf{U}}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi})$ sont les solutions respectives des équations suivantes dans l'espace de Fourier :

$$\widetilde{w}_i(\boldsymbol{\xi}) = \mathrm{i}C_{klmn}\xi_l\widetilde{G}_{ik}(\boldsymbol{\xi})\widetilde{U}_{mn}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}), \tag{3.6}$$

$$\widetilde{U}_{ij}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi}) = -C_{klmn}\xi_l\xi_j\widetilde{G}_{ik}(\boldsymbol{\xi})\widetilde{U}_{mn}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}), \tag{3.7}$$

où $\widetilde{\mathbf{G}}(\boldsymbol{\xi})$ est la transformée de Fourier du tenseur de Green $\mathbf{G}$ associé au milieu homogène de référence de module d'élasticité $\mathbf{C}$. Dans le cas où le comportement est isotrope ($C_{ijkl} = \lambda\delta_{ij}\delta_{kl} + \mu\left(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}\right)$), l'expression de $\widetilde{G}_{ik}(\boldsymbol{\xi})$ est donnée dans [Mura,1987] comme suit :

$$\widetilde{G}_{ik}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\left(\lambda+2\mu\right)\delta_{ik}\xi^2 - \left(\lambda+\mu\right)\xi_i\xi_k}{\mu\left(\lambda+2\mu\right)\xi^4} \quad \forall\boldsymbol{\xi}\neq\mathbf{0}. \tag{3.8}$$

on obtient finalement [Berbenni,2014] :

$$\widetilde{U}_{ij}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi}) = -\left(\lambda+2\mu\right)^{-1}\xi^{-4}\times\Big[\lambda\xi_i\xi_j\xi^2\widetilde{U}_{pp}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi})+\left(\lambda+2\mu\right)\xi_l\xi_j\xi^2\left(\widetilde{U}_{il}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi})+\widetilde{U}_{li}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi})\right) - \left(\lambda+\mu\right)\xi_i\xi_j\xi_k\xi_l\left(\widetilde{U}_{kl}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi})+\widetilde{U}_{lk}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi})\right)\Big], \tag{3.9}$$

A partir de la loi de Hooke et connaissant la distorsion élastique totale $\mathbf{U^e}$, compatible plus incompatible, nous pouvons finalement calculer le tenseur des contraintes de Cauchy dans l'espace de Fourier, noté $\widetilde{\mathbf{T}}(\boldsymbol{\xi})$, à partir de la déformation élastique $\widetilde{\varepsilon}^e(\boldsymbol{\xi})$:

$$\begin{aligned}&\widetilde{T}_{ij}(\boldsymbol{\xi}) = C_{ijkl}\widetilde{\varepsilon}_{kl}^e(\boldsymbol{\xi}) \qquad \forall\boldsymbol{\xi}\neq\mathbf{0}\\ &\widetilde{T}_{ij}(\mathbf{0}) = \overline{T}_{ij}\end{aligned} \tag{3.10}$$

où $\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^e = \widetilde{\mathbf{U}}_{sym}^e$ et $\overline{\mathbf{T}}$ représente la contrainte macroscopique appliquée à la cellule unitaire périodique. Ensuite, le champ de contraintes $\mathbf{T}(\boldsymbol{x})$ est obtenu dans l'espace réel par la transformée de Fourier inverse de $\widetilde{\mathbf{T}}(\boldsymbol{\xi})$.

Nous passons maintenant au cas de l'élasticité hétérogène. Nous supposons toujours une contrainte macroscopique appliquée $\overline{\mathbf{T}}$ (conditions aux limites en contraintes). Les distorsions élastiques incompatibles sont toujours obtenues dans l'espace de Fourier en résolvant l'équation 3.4. En élasticité hétérogène, le tenseur des modules élastiques est écrit $\mathbf{C}(\mathbf{x}) = \mathbf{C_0} + \partial\mathbf{C}(\mathbf{x})$, où $\mathbf{C_0}$ est l'élasticité d'un milieu homogène de référence à choisir et $\partial\mathbf{C}(\mathbf{x})$ est la fluctuation spatiale. Avec cette définition, l'équation d'équilibre peut être reformulée comme :

$$C_{ijkl}^0 w_{k,lj} + \tau_{ij,j} = 0. \tag{3.11}$$

Dans l'équation 3.11, $\boldsymbol{\tau}$ est le tenseur de polarisation des contraintes :

$$\tau_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{e,\perp} + \delta C_{ijkl} w_{k,l}. \tag{3.12}$$

Ce champ est dû à l'incompatibilité de la déformation élastique résultant de la présence des dislocations à travers le terme $\mathbf{T}^\perp = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^{e,\perp}$, et des hétérogénéités élastiques à travers le terme $\delta\mathbf{C}$: $\mathbf{grad}\,\mathbf{w}$. L'expression de $\boldsymbol{\tau}$ contient le champ

inconnu du problème $\mathbf{U}^{e,\parallel}$ au travers du terme $\delta\mathbf{C} : \mathbf{grad}\,\mathbf{w}$. Ainsi, l'équation 3.11 est implicite et doit être résolue au travers d'une méthode itérative. En utilisant la technique des fonctions de Green d'un milieu élastique homogène de référence, l'équation 3.11 peut être résolue sous la forme d'une équation intégrale de type Lippmann-Schwinger dont le champ inconnu est la déformation élastique compatible $\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel}$, avec un terme supplémentaire $\mathbf{T}^{\perp}$ dû à la présence de densités de dislocations :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel}(\mathbf{x}) = \langle \boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel} \rangle - \left(\boldsymbol{\Gamma}^0 \star \boldsymbol{\tau} \right)(\mathbf{x}), \tag{3.13}$$

où $\star$ dénote la convolution spatiale, $\langle \boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel} \rangle$ est la valeur moyenne de $\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel}$ dans V et $\boldsymbol{\Gamma}^0$ représente le tenseur de Green modifié associé au milieu de référence homogène élastique de module $\mathbf{C}^0$. Pour résoudre cette équation, nous utilisons l'algorithme à point fixe ("schéma basique") développé par Moulinec et Suquet [Moulinec,1994], avec des conditions aux limites en contraintes. La transformée de Fourier de l'équation 3.13 s'écrit :

$$\begin{aligned} \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi}) &= -\widetilde{\boldsymbol{\Gamma}}^0(\boldsymbol{\xi}) : \widetilde{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{\xi}) \;\forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \\ \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{e,\parallel}(\mathbf{0}) &= \langle \boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel} \rangle = \mathbf{C}^{0^{-1}} : \left(\overline{\mathbf{T}} - \langle \boldsymbol{\tau} \rangle \right) \end{aligned} \tag{3.14}$$

où $\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi})$ et $\widetilde{\boldsymbol{\Gamma}}^0(\boldsymbol{\xi})$ sont les transformées de Fourier de $\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel}(\boldsymbol{x})$ et $\boldsymbol{\Gamma}^0(\mathbf{x})$. L'algorithme basique avec champs incompatibles est présenté ci-dessous. Cet algorithme est constitué de deux procédures consécutives : (i) la procédure d'initialisation qui correspond au calcul de la distorsion élastique incompatible $\mathbf{U}^{e,\perp}(\mathbf{x})$ à travers la résolution de l'équation de type Poisson 3.4 dans l'espace de Fourier, puis à l'initialisation de $\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel}$ pour une contrainte macroscopique appliquée $\overline{\mathbf{T}}$, et, (ii) la procédure itérative globale basée sur le schéma basique pour la résolution de l'équation 3.13, où $\boldsymbol{\varepsilon}^{e,\parallel}(\mathbf{x})$ est obtenue après convergence. Le critère de convergence est basé sur l'équilibre des contraintes locales dans l'espace de Fourier :

$$e_n = \frac{\|\mathbf{div}(\mathbf{T}_n)\|_2}{|\langle \mathbf{T}_n \rangle|} = \frac{\|\boldsymbol{\xi}.\widetilde{\mathbf{T}}_n(\boldsymbol{\xi})\|_2}{|\widetilde{\mathbf{T}}_n(\mathbf{0})|} \leq \epsilon, \tag{3.15}$$

où $\|.\|_2$ dénote la norme L^2, $|.|$ dénote la norme Euclidienne d'un tenseur d'ordre deux et e_n représente l'erreur à l'itération (n). La convergence est atteinte lorsque l'erreur est inférieure à une précision ϵ donnée qui est de l'ordre de $10^{-6} - 10^{-8}$ dans nos simulations. Il faut préciser que dans le cas de l'élasticité homogène, les champs de contrainte et de déformation sont obtenus dès la première itération de l'algorithme.

Algorithm 1 Schéma basique avec distorsions élastiques incompatibles et avec conditions aux limites en contraintes

Initialisation : ($\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{x})$ donné)

1: $\widetilde{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow \text{FFT}(\boldsymbol{\alpha})$
2: Résolution de $\widetilde{\mathbf{U}}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi})$:

$$\widetilde{U}_{ij}^{e,\perp}(\boldsymbol{\xi}) = \mathrm{i}\frac{\xi_k}{\xi^2} e_{jkl}\widetilde{\alpha}_{il}(\boldsymbol{\xi}) \ \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \quad \text{et}$$

$$\widetilde{U}_{ij}^{e,\perp}(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$$

3: $\mathbf{U}^{e,\perp}(\mathbf{x}) \leftarrow \text{FFT}^{-1}(\widetilde{\mathbf{U}}^{e,\perp})$
4: $\boldsymbol{\varepsilon}_0^{e,\parallel} \leftarrow \langle \boldsymbol{\varepsilon}_0^{e,\parallel} \rangle = \mathbf{C}^{0\,-1} : \overline{\mathbf{T}}$
5: $\mathbf{T}_0(\mathbf{x}) \leftarrow \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \left(\boldsymbol{\varepsilon}_0^{e,\parallel} + \boldsymbol{\varepsilon}^{e,\perp}(\mathbf{x})\right)$

Itération : $n+1$ ($\boldsymbol{\varepsilon}_n^{e,\parallel}(\mathbf{x})$ et $\mathbf{T}_n(\mathbf{x})$ connus)

6: $\widetilde{\mathbf{T}}_n(\boldsymbol{\xi}) = \text{FFT}(\mathbf{T}_n)$
7: Test de convergence basé sur l'équation 3.20
8: $\widetilde{\boldsymbol{\tau}}_n(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow \widetilde{\mathbf{T}}_n(\boldsymbol{\xi}) - \mathbf{C}^0 : \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}_n^{e,\parallel}}(\boldsymbol{\xi})$
9: $\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi}) \leftarrow -\widetilde{\boldsymbol{\Gamma}}^0(\boldsymbol{\xi}) : \widetilde{\boldsymbol{\tau}}_n(\boldsymbol{\xi}) \ \forall \boldsymbol{\xi} \neq \mathbf{0} \quad \text{et} \quad \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^{e,\parallel}(\mathbf{0}) \leftarrow \langle \boldsymbol{\varepsilon}_n^{e,\parallel} \rangle$
10: $\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{e,\parallel}(\mathbf{x}) \leftarrow \text{FFT}^{-1}(\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_{n+1}^{e,\parallel}(\boldsymbol{\xi}))$
11: $\mathbf{T}_{n+1}(\mathbf{x}) \leftarrow \mathbf{C}(\mathbf{x}) : \left(\boldsymbol{\varepsilon}_{n+1}^{e,\parallel}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\varepsilon}^{e,\perp}(\mathbf{x})\right)$

Nous considérons une cellule unitaire périodique avec les périodes spatiales T_1, T_2 et T_3 dans les directions x_1, x_2 et x_3, respectivement. Le VER est discrétisé en une grille parallélépipédique régulière de $N_1 \times N_2 \times N_3$ voxels avec un vecteur position $\boldsymbol{x} = ((i_1-1)\delta_1, (i_2-1)\delta_2, (i_3-1)\delta_3)$, où $i_1 = 1 \rightarrow N_1$, $i_2 = 1 \rightarrow N_2$, $i_3 = 1 \rightarrow N_3$, δ_1, δ_2 et δ_3 sont les tailles des pixels dans les directions x_1, x_2 et x_3. Ici, nous prenons $\delta_1{=}\delta_2{=}\delta_3{=}\delta$. Le nombre total de points sur la grille FFT est donné par $N_{tot} = N_1 \times N_2 \times N_3$. La transformée de Fourier d'une fonction f est $\widetilde{f} = \text{FFT}(f)$. Sa transformée de Fourier inverse est $f = \text{FFT}^{-1}\left(\widetilde{f}\right)$. D'après la convention Matlab-FFTW [Frigo,1998], la FFT et la FFT^{-1} s'écrivent :

$$\begin{aligned}\widetilde{f}(m_1,m_2,m_3) = &\sum_{i_1=1}^{N_1}\sum_{i_2=1}^{N_2}\sum_{i_3=1}^{N_3} f(i_1,i_2,i_3) \times \\ &\exp\left(-2\pi\mathrm{i}\left(\frac{(i_1-1)(m_1-1)}{N_1} + \frac{(i_2-1)(m_2-1)}{N_2} + \frac{(i_3-1)(m_3-1)}{N_3}\right)\right)\end{aligned} \tag{3.16}$$

et

$$f\left(i_1,i_2,i_3\right)=\frac{1}{N_{tot}}\sum_{\xi_1=1}^{N_1}\sum_{\xi_2=1}^{N_2}\sum_{\xi_3=1}^{N_3}\widetilde{f}\left(m_1,m_2,m_3\right)\times \\ \exp\left(+2\pi\mathrm{i}\left(\frac{(i_1-1)(m_1-1)}{N_1}+\frac{(i_2-1)(m_2-1)}{N_2}+\frac{(i_3-1)(m_3-1)}{N_3}\right)\right), \tag{3.17}$$

où les m_j $(j=1\rightarrow 3)$ sont arrangés dans l'espace de Fourier comme suit :

$$m_j=\left(\left(-\frac{N_j}{2}+1\right),\left(-\frac{N_j}{2}+2\right),...,-1,0,1,...,\left(\frac{N_j}{2}-1\right),\left(\frac{N_j}{2}\right)\right) \tag{3.18}$$

si N_j est pair, et

$$m_j=\left(\left(-\frac{N_j-1}{2}\right),...,-1,0,1,...,\left(\frac{N_j-1}{2}\right)\right) \tag{3.19}$$

si N_j est impair. L'approximation classique des dérivées partielles de premier ordre est définie par :

$$\mathrm{i}\xi_j=\mathrm{i}\frac{2\pi m_j}{T_j}, \tag{3.20}$$

où, les m_j sont définis par les équations 3.18 et 3.19, avec $j=1\rightarrow 3$. Nous montrons dans la suite que cette approximation classique peut générer d'importantes oscillations numériques lors de la solution des équations de Poisson et d'équilibre. Pour améliorer la stabilité et la précision numérique, nous essayons d'autres schémas de dérivations. Nous essayons pour l'équation de Poisson un schéma différences finies centrées qui revient à remplacer les approximations classiques par :

$$\mathrm{i}\xi_j = \frac{\mathrm{i}}{\delta}\sin\left(\frac{2\pi m_j}{N_j}\right) \tag{3.21}$$

$$-(\xi_j)^2 = \frac{2}{\delta^2}\left(\cos\left(\frac{2\pi m_j}{N_j}\right)-1\right) \tag{3.22}$$

$$-\xi_j\xi_l = \frac{1}{2\delta^2}\left[\cos\left(2\pi\left(\frac{m_j}{N_j}+\frac{m_l}{N_l}\right)\right)-\cos\left(2\pi\left(\frac{m_j}{N_j}-\frac{m_l}{N_l}\right)\right)\right], \tag{3.23}$$

Pour le calcul des dérivées spatiales intervenant dans l'opérateur de Green modi-

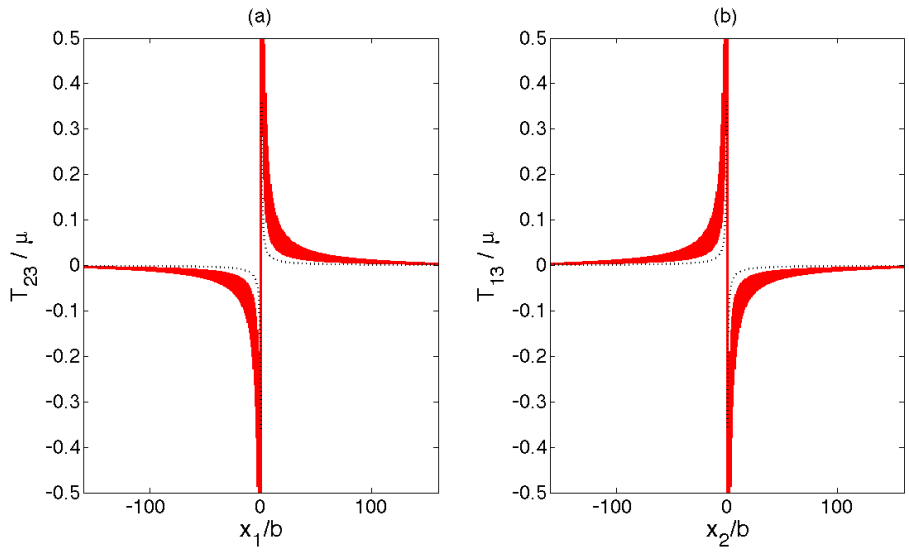


FIGURE 3.1 – Profils des contraintes T_{13} et T_{23} présentant des oscillations numériques, obtenus avec la méthode FFT classique, pour une densité de dislocation vis α_{33} définie sur un seul pixel au centre de la grille de simulation. La solution analytique est représentée par les lignes en pointillés noirs.

fié, nous utilisons le schéma rotated [Willot,2015]. Ce schéma très efficace en terme de précision numérique est comparé dans la suite à l'approximation classique. Ce schéma revient à remplacer l'approximation classique par :

$$\mathrm{i}\xi_j = \frac{\mathrm{i}}{4\delta}\tan\left(\frac{\pi m_j}{N_j}\right)\left(1+\exp\left(\mathrm{i}\frac{2\pi m_1}{N_1}\right)\right)\left(1+\exp\left(\mathrm{i}\frac{2\pi m_2}{N_2}\right)\right)\left(1+\exp\left(\mathrm{i}\frac{2\pi m_3}{N_3}\right)\right), \tag{3.24}$$

Nous présentons maintenant les résultats. Dans toutes les simulations, une très faible contrainte macroscopique de traction est imposée pour des raisons de convergence et de façon à ne voir en sortie que les contraintes internes associées aux dislocations et aux hétérogénéités élastiques. Nous commençons en élasticité homogène. Le premier résultat intéressant est l'efficacité du schéma différences finies centrées pour la solution de l'équation de Poisson, pour des distributions de dislocations compactes. Il a en effet été rapporté récemment que si la densité de dislocation est définie sur un seul pixel, de fortes oscillations numériques apparaissent sur les solutions numériques des champs élastiques obtenues par la méthode FFT classique [Brenner,2014]. Sur les figures 3.1 et 3.2, nous comparons les champs de contraintes hors plan pour une densité de dislocation vis définie sur un seul voxel, avec le calcul classique des dérivées spatiales et avec le schéma différences finies centrées, en comparaison avec la solution analytique [Berbenni,2014]. L'utilisation du schéma

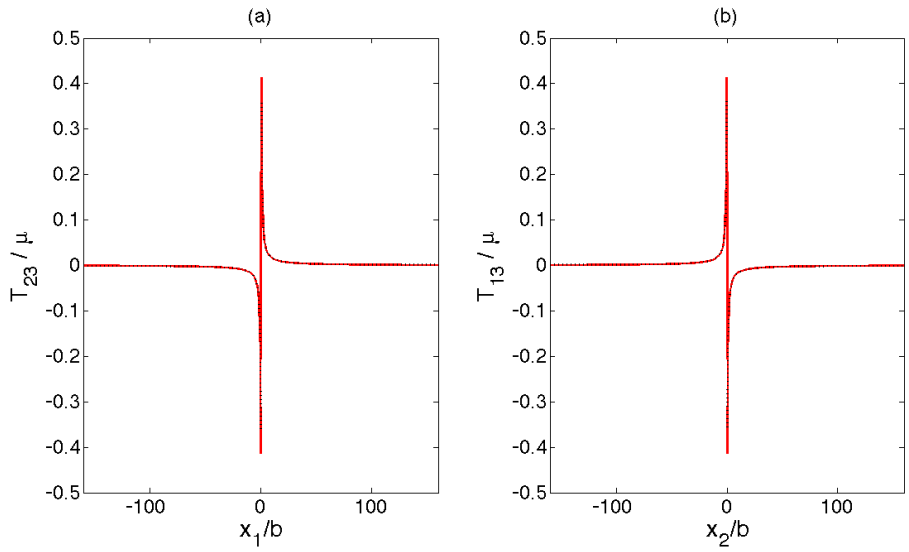


FIGURE 3.2 – Profils des contraintes T_{13} et T_{23} sans oscillations numériques, obtenus avec la nouvelle approche FFT, pour une densité de dislocation vis α_{33} définie sur un seul pixel au centre de la grille de simulation. La solution analytique est représentée par les lignes en pointillés noirs.

différences finies centrées pour la résolution des distorsions élastiques incompatibles ne génère aucune oscillation et est en excellent accord avec la solution analytique. Avec la méthode classique cependant, de fortes oscillations sont observées et même la tendance moyenne des profils de contraintes est en désaccord avec la solution analytique. Toujours dans le cadre de l'élasticité homogène, nous comparons finalement notre méthode spectrale avec une approximation éléments finis (EF). La méthode EF utilise des éléments bidimensionnels triangulaires linéaires et le solveur GMRES (Gradient Minimal Residual). Ce solveur permet d'utiliser de grands maillages avec le code FreeFem++ [Hecht,2012, Hecht,2017]. La figure 3.3 compare les cartes de contraintes T_{13} et T_{23} obtenues pour une densité de dislocation vis. La taille du maillage 2D est de 1024 par 1024 noeuds/voxels. Une bonne correspondance entre les méthodes FFT et EF est observée. Les deux méthodes se révèlent très précises dans le calcul des champs élastiques. Cependant, la méthode FFT se montre plus attractive en terme de temps de calcul. En effet, sur un ordinateur portable et sur un seul processeur, le temps de calcul nécessaire pour la simulation FFT est de 6.3 secondes alors qu'il approche les 20 minutes dans les simulations EF. Ce gain en temps de calcul est encore plus considérable dans le cas des problèmes tridimensionnels montrés ci-dessous.

Nous passons maintenant au cas de l'élasticité hétérogène [Djaka,2017]. Dans ces applications 2D et 3D, nous considérons des matériaux composites à deux phases, constitués d'inclusions (dénotées par I) et d'une matrice (dénotée par M), et conte-

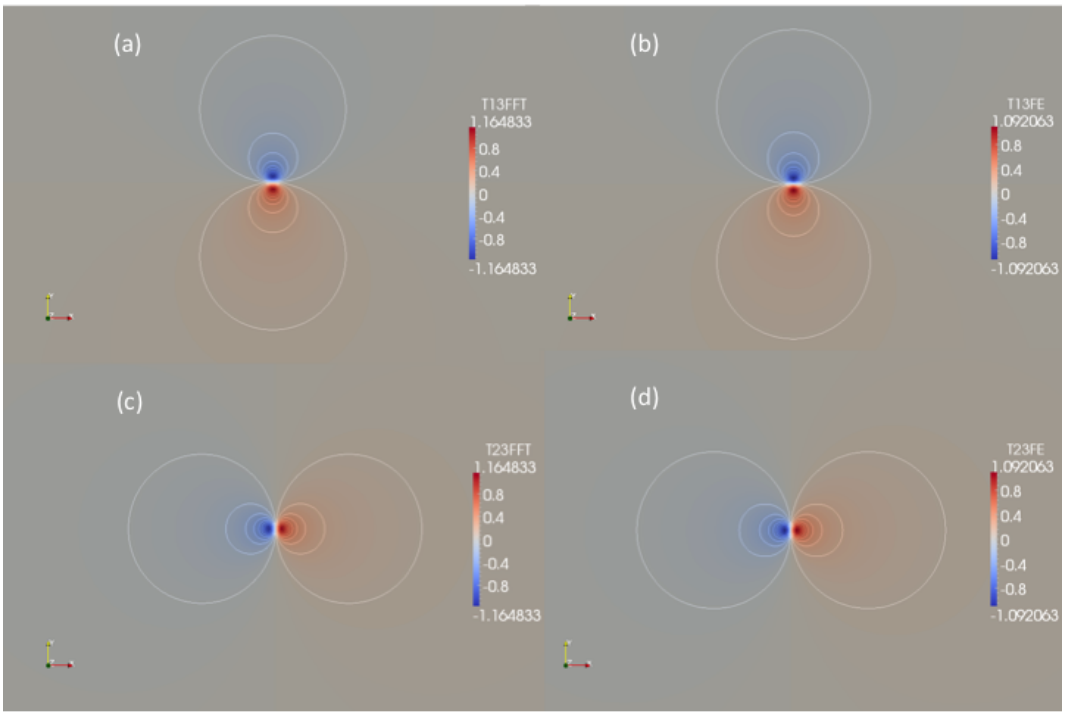


FIGURE 3.3 – Comparison des cartes de contraintes de cisaillement T_{13} (a, b) et T_{23} (c, d) (normalisées par μ) pour une distribution de densité de dislocation vis, obtenues par FFT avec 1024×1024 pixels (a, c) et par EF avec 1024×1024 noeuds (b, d).

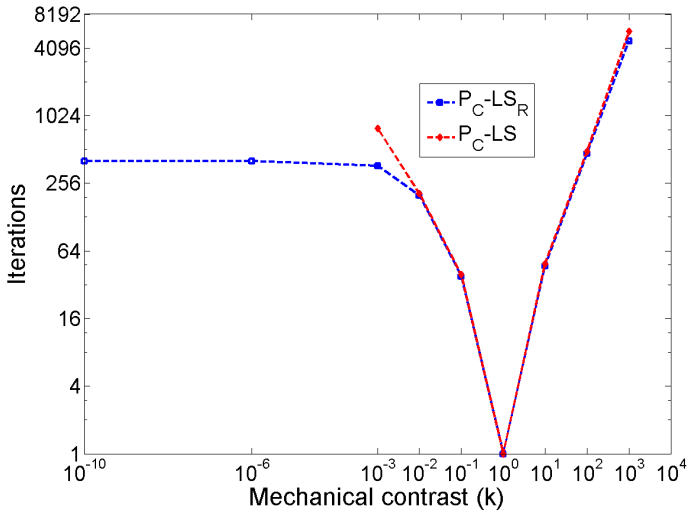
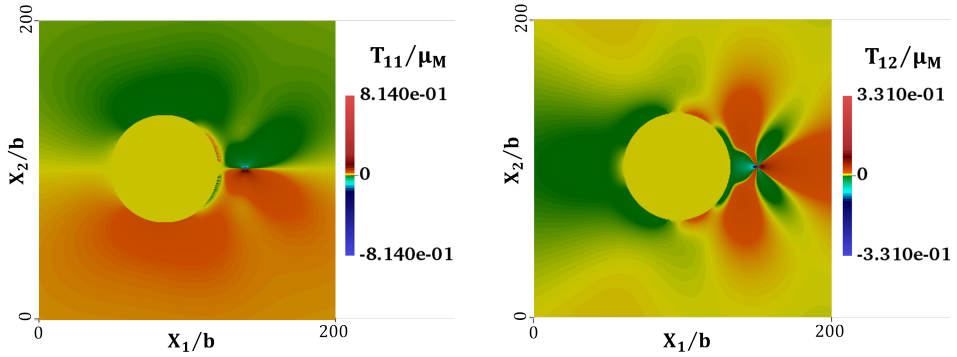


FIGURE 3.4 – Etude comparative des nombres d'itérations nécessaires pour converger, pour différents contrastes mécaniques k, dans le cas de l'interaction entre une inclusion circulaire et une densité de dislocation coin située dans la matrice d'un matériau composite [Djaka,2017]. En bleu : Utilisation du schéma rotated. En rouge : calcul classique. Dans les deux cas, le schéma différences finies centrées a été utilisé pour l'équation de Poisson.



(a) (b)

FIGURE 3.5 – Cartes 2D des contraintes T_{11} et T_{12} (normalisées par μ_M) obtenues dans le cas d'une densité de dislocation coin α_{13} définie sur un seul pixel et situé à proximité d'un trou circulaire dans une matrice [Djaka,2017]. Les schémas différences finies centrées et rotated sont utilisés.

nant différentes distributions spatiales de densités de dislocations. La matrice a un comportement élastique, linéaire et isotrope avec un module d'Young $E_M = 62780$ MPa et un coefficient de Poisson $\nu_M = 0.3647$. Le module d'Young E_I et le coefficient de Poisson ν_I de l'inclusion sont déduits de la définition du contraste mécanique $k = E_I/E_M = \mu_I/\mu_M$ (en supposant $\nu_I = \nu_M$), où μ_I et μ_M sont les modules de cisaillement respectifs de l'inclusion et de la matrice. Comme dans le cas de l'élasticité homogène, nous avons de nouveau observé qu'il est préférable d'utiliser le schéma différences finies centrées pour le calcul des distorsions élastiques incompatibles, surtout pour des distributions de dislocations compactes. Le résultat majeur observé ici est l'efficacité remarquable du schéma rotated pour le calcul du tenseur de Green modifié afin de résoudre l'équilibre des contraintes avec le schéma basique. Dans le cas d'une densité de dislocation coin distribuée sur un seul voxel dans la matrice, à proximité d'une inclusion, nous avons comparé pour différents contrastes mécaniques l'efficacité en terme de nombre d'itérations à convergence avec et sans le schéma rotated (le schéma différences finies centrées est utilisé pour l'équation de Poisson dans les 2 cas). Les contrastes mécaniques explorés sont compris entre $k = 10^{-10}$ et $k = 10^3$ et une précision $\epsilon = 10^{-6}$ est exigée pour la convergence des contraintes. Sur la figure 3.4, nous voyons que l'utilisation du schéma rotated permet d'accélérer la convergence pour les contrastes mécaniques $k < 1$. De plus, il est même possible de converger dans le cas d'une inclusion équivalente à un vide et d'obtenir des champs élastiques sans aucune oscillation numérique, comme le montre la figure 3.5. En revanche, pour les contrastes mécaniques $k > 1$, l'utilisation du schéma rotated n'améliore pas significativement la vitesse de convergence.

Comme dernière application, nous présentons maintenant une simulation tridimensionnelle, en vue de mettre en évidence l'efficacité numérique de notre méthode spectrale. Nous simulons ici une microstructure biphasée constituée de boucles de dislocations autour de précipités cubiques noyés dans une phase matrice. La cellule unitaire est discrétisée avec une grille FFT 3D de $128 \times 128 \times 128 = 2097152$ voxels avec une taille de voxel de 10^{-9}m. La cellule unitaire contient $8 \times 8 \times 8 = 512$ inclusions cubiques. Les constantes élastiques de la phase matrice sont $\mu_M = 124.2$ GPa et ν_M=0.3. Les constantes élastiques des inclusions dépendent du contraste mécanique k entre les deux phases, avec $\nu_I = \nu_M$. La taille des inclusions cubiques est de $8 \pm 3 \times 10^{-9}$m et la fraction volumique des précipités dans la boîte de simulation est $f_I = V_I/V = 0.15$. Chaque inclusion est entourée de 3 ± 1 boucles prismatiques de dislocations constituées des densités α_{31} (ligne de dislocation suivant la direction $\mathbf{e}_1$) et α_{32} (ligne de dislocation suivant la direction $\mathbf{e}_2$), avec un vecteur de Burgers dans la direction $\mathbf{e}_3$ et de norme b=4.05×10^{-10}m. Cinq différents contrastes ont été utilisés dans les simulations, $k = 0.9$, $k = 0.1$, $k = 10$, $k = 0.01$ et $k = 100$. Une précision de $\epsilon = 10^{-6}$ est adoptée pour le critère de convergence sur la contrainte, et les nombres d'itérations à la convergence sont, respectivement, 5, 30, 35, 156 et 283 pour les cinq contrastes. Les figures 3.6 (b),(c), (d), (e) et (f) montrent les champs de contrainte interne T_{33} obtenus pour les cinq contrastes mécaniques. Les champs élastiques ne contiennent aucune oscillation, malgré la présence des forts gradients

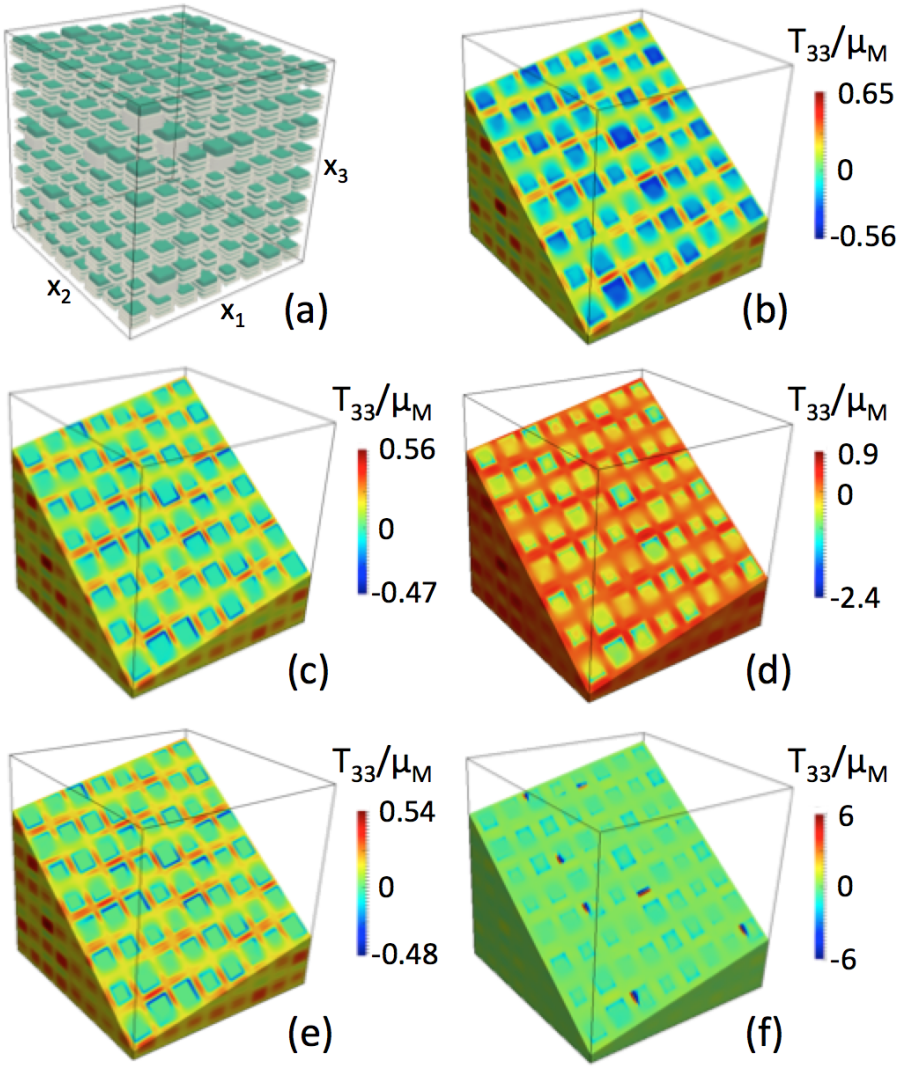


FIGURE 3.6 – Calcul des contraintes internes dans une matrice contenant des inclusions cubiques entourées de boucles de dislocations. (a) : La cellule unitaire est discrétisée avec une grille FFT 3D de $128 \times 128 \times 128 = 2097152$ voxels avec une taille de voxel de 10^{-9}m et contient $8 \times 8 \times 8 = 512$ inclusions cubiques (couleur verte). La fraction volumique des inclusions est de 0.15. Chacune des inclusions cubiques de taille $8 \pm 3 \times 10^{-9}$m est entourée de 3 ± 1 boucles de dislocations (couleur grise). Les boucles prismatiques de dislocations ont un vecteur de Burgers suivant la direction $\mathbf{e}_3$, de norme b=4.05 $\times$ 10^{-10}m. (b,c,d,e,f) : Champs de contrainte interne T_{33} normalisée par μ_M pour cinq contrastes mécaniques différents k : 0.9 (b), 0.1 (c), 10 (d), 0.01 (e) et 100 (f) [Djaka,2017].

spatiaux dans le cas du contraste mécanique $k = 100$. Il est important de noter pour conclure que ces calculs ont été effectués sur un ordinateur portable, sur un seul processeur. Dans les mêmes conditions, un calcul par éléments finis est tout simplement impensable.

3.2 Résolution de l'équation de transport des densités de dislocations

Nous présentons ici le développement d'une approche spectrale pour résoudre l'équation de transport des densités de dislocations. L'objectif est de pouvoir étendre par la suite la mécanique des champs de dislocations et notamment sa version mésoscopique à la simulation d'agrégats polycristallins réalistes. Comme mentionné dans l'introduction, la résolution spectrale de l'équation de transport est délicate pour deux raisons essentielles. D'abord, la nature hyperbolique de l'équation de transport constitue une source d'instabilités numériques car les moindres perturbations numériques sont conservées et propagées. Ensuite, ces instabilités sont renforcées par l'apparition de fortes oscillations qui sont inhérentes aux approximations spectrales, surtout dans les régions avec de forts gradients spatiaux. Dans la littérature, des filtres spectraux ont été utilisés pour dissiper les perturbations de hautes fréquences qui se développent dans la résolution des équations de nature hyperbolique, afin d'obtenir des solutions numériques stables [Majda,1978, Kopriva,1987, Maday,1989, Vendeven,1991, Gottlieb,1992, Cai,1992, Gottlieb,1997, Gottlieb,2001, Shanthraj,2015]. Dans nos études, nous avons testé l'influence de deux filtres passe-bas sur la stabilité numérique et la précision de la solution de l'équation de transport des densités de dislocations. Le premier est le filtre cosinus [Majda,1978, Kopriva,1987, Vendeven,1991, Gottlieb,1997, Shanthraj,2015] et le second le filtre exponentiel [Majda,1978, Kopriva,1987, Maday,1989, Vendeven,1991, Gottlieb,1992, Cai,1992, Gottlieb,1997, Gottlieb,2001]. Nous ne présentons ici que le filtre exponentiel qui s'est révélé meilleur, notamment car il est ajustable en fonction des simulations réalisées et permet un lissage contrôlé des oscillations alors que le filtre cosinus n'est pas réglable et tend à trop lisser les solutions. Nous présentons également des comparaisons avec des solutions exactes et des approximations éléments finis basées sur le schéma Galerkin / moindres-carrés [Varadhan,2006]. Nous montrerons finalement une simulation tridimensionnelle dont le but est de montrer la stabilité et surtout l'efficacité numérique par rapport à une méthode éléments finis [Djaka,2015]. Nous commençons par rappeler l'équation de transport des densités de dislocations :

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = -\mathbf{rot}\left(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{v}\right). \tag{3.25}$$

Dans cette étude, les vitesses des dislocations seront supposées constantes et ne dépendront que du signe des densités de dislocations (nous n'utilisons pas les forces de Peach Koehler). Par conséquent l'équation 3.25 est réduite à une version purement cinématique. Cette équation s'écrit sous forme indicielle :

$$\dot{\alpha}_{ij} = -\left(\alpha_{ij} v_k\right)_{,k} + \left(\alpha_{ik} v_j\right)_{,k} \tag{3.26}$$

Nous souhaitons intégrer cette équation dans le temps au travers de la forme explicite suivante :

$$\alpha_{ij}^{t+\triangle t} = \alpha_{ij}^{t} - \triangle t \, \left[\left(\alpha_{ij} v_k\right)^t - \left(\alpha_{ik} v_j\right)^t\right]_{,k}, \tag{3.27}$$

où $\triangle t$ est le pas de temps. Nous commençons par traiter un problème unidimensionnel, afin de pouvoir utiliser une solution analytique et une approximation éléments finis comme éléments de comparaison et de validation. Nous considérons ici le glissement d'une densité de dislocation coin :

$$\dot{\alpha}_{12} = -\left(\alpha_{12} v_1\right)_{,1}, \tag{3.28}$$

avec $v_1 = v_0 \alpha_{12}/|\alpha_{12}|$, où v_0 est une vitesse constante. Cette équation peut encore être écrite sous la forme simplifiée suivante :

$$\dot{\alpha} = -v_0 \frac{\alpha}{|\alpha|} \left(\alpha\right)_{,x} = -v_0 sgn(\alpha) \alpha_{,x}, \tag{3.29}$$

Nous utilisons ci-dessous cette équation pour simuler la propagation et l'annihilation de deux densités de dislocation de signe opposé. C'est un cas de référence pour valider notre méthode numérique. L'équation à résoudre et à intégrer numériquement pour prédire l'évolution des densités de dislocation est donc :

$$\alpha^{t+\triangle t} = \alpha^t - \triangle t \; v_0 \; sgn(\alpha) \left(\alpha^t\right)_{,x}. \tag{3.30}$$

Soit $\widetilde{\boldsymbol{\alpha}}(\boldsymbol{\xi})$ la transformée de Fourier de $\boldsymbol{\alpha}(\boldsymbol{x})$. L'équation 3.27 écrite dans l'espace de Fourier est :

$$\widetilde{\alpha}_{ij}^{t+\triangle t} = \widetilde{\alpha}_{ij}^{t} - \triangle t \; \mathrm{i} \; \xi_k \left[\widetilde{\left(\alpha_{ij} v_k\right)}^t - \widetilde{\left(\alpha_{ik} v_j\right)}^t\right]. \tag{3.31}$$

L'équation du problème 1D devient elle :

$$\widetilde{\alpha}^{t+\triangle t} = \widetilde{\alpha}^{t} - \triangle t \ \mathrm{i} \ \xi \ v_0 \ sgn(\alpha) \widetilde{\alpha}^{t}. \tag{3.32}$$

Le filtrage est largement utilisé dans les méthodes spectrales pour éliminer les instabilités dans les problèmes hyperboliques [Gottlieb,2001]. Nous nous intéressons ici au filtre exponentiel passe-bas [Vendeven,1991, Gottlieb,1997, Gottlieb,2001]. Il est défini en 3D par :

$$\sigma\left(\xi\right) = \exp\left(-\beta\left(\left(\frac{m_1}{N_1}\right)^{2p} + \left(\frac{m_2}{N_2}\right)^{2p} + \left(\frac{m_3}{N_3}\right)^{2p}\right)\right), \tag{3.33}$$

et en 1D par :

$$\sigma\left(\xi\right) = \exp\left(-\beta\left(\frac{m}{N}\right)^{2p}\right). \tag{3.34}$$

Le paramètre d'amortissement est $\beta = -\ln \varepsilon_M$, où ε_M est une petite valeur à déterminer [Gottlieb,2001]. 2p représente l'ordre du filtre exponentiel, p étant un entier naturel. L'application de ces filtres spectraux à l'équation 3.31 se fait de la façon suivante [Djaka,2015] :

$$\widetilde{\alpha}_{ij}^{t+\triangle t} = \sigma\left(\xi\right)\left[\widetilde{\alpha}_{ij}^{t} - \triangle t \ \mathrm{i} \ \xi_k \ \left(\widetilde{\left(\alpha_{ij} v_k\right)}^{t} - \widetilde{\left(\alpha_{ik} v_j\right)}^{t}\right)\right]. \tag{3.35}$$

Pour la version unidimensionnelle nous avons :

$$\widetilde{\alpha}^{t+\triangle t} = \sigma\left(\xi\right)\left[\widetilde{\alpha}^{t} - \triangle t \ \mathrm{i} \ \xi \ v_0 \ sgn(\alpha) \widetilde{\alpha}^{t}\right]. \tag{3.36}$$

Cette méthode spectrale filtrée est maintenant appliquée à la résolution du problème de transport et d'annihilation de deux densités de dislocation de signe opposé, dans un milieu périodique 1D. La solution exacte de ce problème a été reportée et comparée à des approximations éléments finis Galerkin et moindres carrés [Varadhan,2006]. La distribution de la densité de dislocation initiale est définie par deux demi-sinusoïdes de même amplitude et de signe opposé. La stabilité physique est maintenue lorsque le nombre de Courant $c = \triangle t \ v_0/\delta$ est inférieur à 1. Tout d'abord, l'approche classique non filtrée est utilisée. La cellule périodique 1D est discrétisée en $N = 1024$ points et nous prenons $c = 0.25$. La figure 3.7 [Djaka,2015]

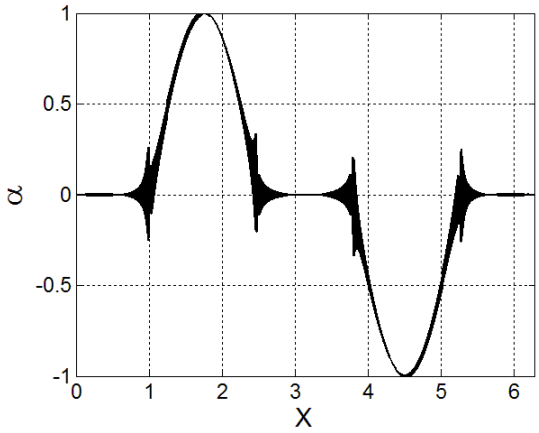


FIGURE 3.7 – Distribution spatiale de la densité de dislocation α obtenue avec l'approche spectrale classique sans filtre, quelques pas de temps après le début de la simulation. On observe l'apparition de fortes oscillations bien avant l'annihilation des densités de dislocation [Djaka,2015].

$\mathbf{N_{tot}}$	**CPU times**	
	FFT	**EF-GLS**
32^3	0.032	20.110
64^3	0.081	164.82
128^3	0.590	1354.3
256^3	5.310	-
512^3	56.00	-

TABLE 3.1 – Comparaison des temps de calcul (en secondes) entre l'approche spectrale et la méthode éléments finis GLS, en fonction du nombre de voxels (N_{tot}) et pour seul un pas de temps, dans le cas de la boucle de dislocation 3D [Djaka,2015].

montre l'apparition de fortes oscillations numériques dès le début de la simulation. Nous essayons maintenant le filtre exponentiel. Pour cette simulation et suite à plusieurs essais numériques, nous réussissons à obtenir une approximation stable et très proche de la solution exacte avec un filtre d'ordre 2 ($p = 1$) et $\varepsilon_M = 0.2$. L'évolution de la densité de dislocation α est comparée à la solution exacte dans la figure 3.8, à divers instants jusqu'à la complète annihilation. Cette figure montre que l'approximation spectrale utilisant le filtre exponentiel est stable et précise par comparaison avec la solution exacte. Nous comparons aussi notre approche avec les méthodes éléments finis moindres-carrés (LS) et Galerkin / moindres-carrés (GLS) développées par Varadhan et al. [Varadhan,2006]. On note une bonne comparaison avec les méthodes éléments finis.

Comme dernière validation de l'approche spectrale filtrée, nous considérons une

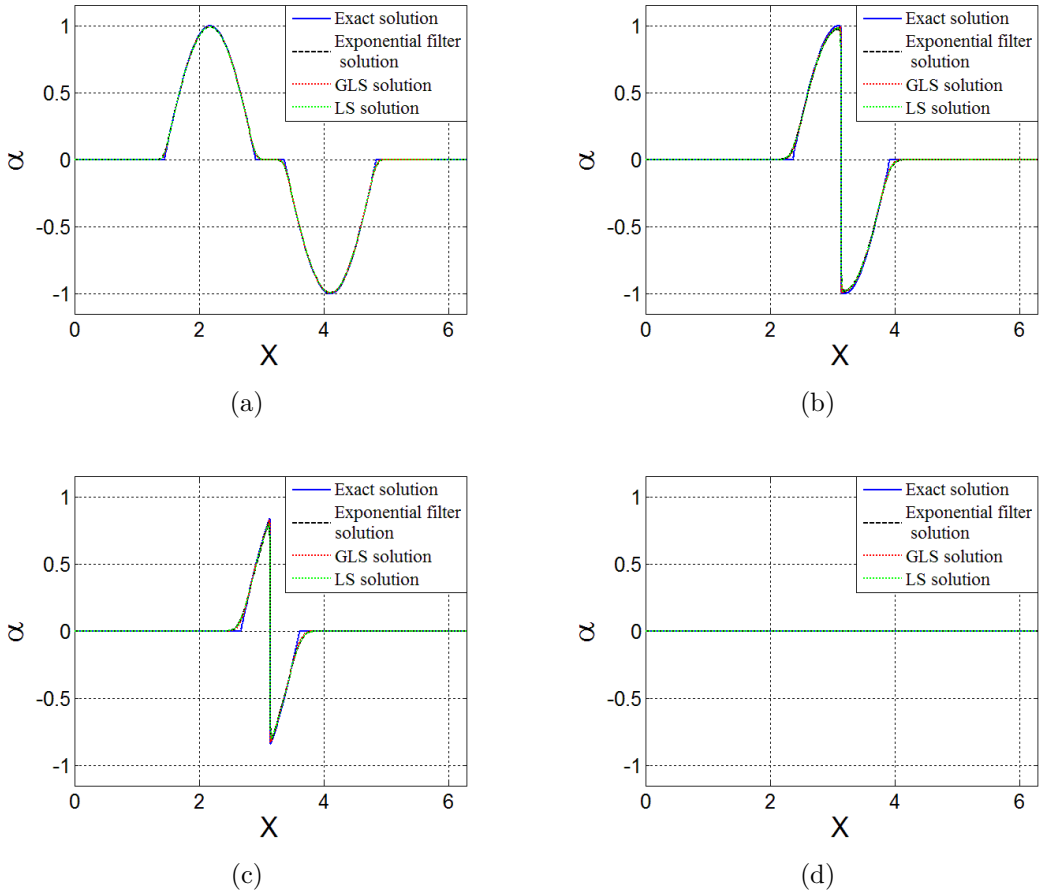


FIGURE 3.8 – Distribution spatiale de la densité de dislocation α dans la configuration 1D à quatre étapes différentes jusqu'à l'annihilation complète : (a) : $t = 9.2\times10^{-10}s$, (b) : $t = 2.76\times10^{-9}s$, (c) : $t = 3.37\times10^{-9}s$ et (d) : $t = 4.93\times10^{-9}s$. Comparaisons de l'approche spectrale avec le filtre exponentiel avec la solution exacte et les simulations éléments finis LS et GLS [Djaka,2015].

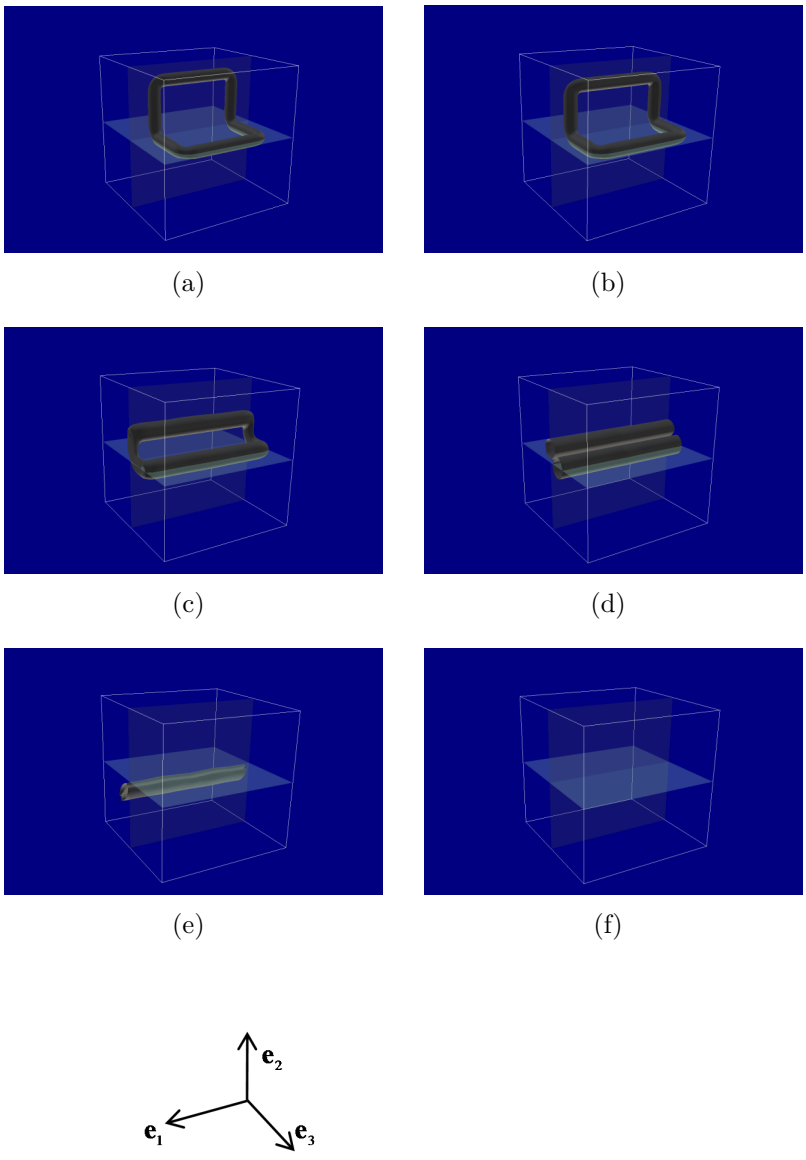
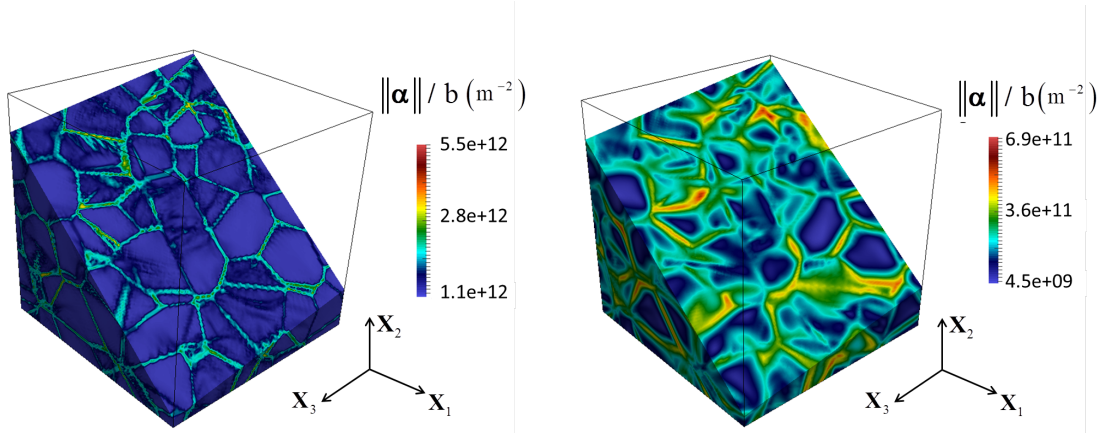


FIGURE 3.9 – Evolution d'une boucle de dislocation 3D multi-planaire simulée avec l'approche spectrale filtrée. Les résultats sont montrés à six instants différents jusqu'à l'annihilation totale de la boucle [Djaka,2015].

boucle de dislocation plus complexe en 3D. Le but est de montrer que (i), la solution demeure stable dans les situations non triviales d'expansion et d'annihilation de dislocations et (ii), le temps de calcul est beaucoup plus faible que celui obtenu avec une méthode éléments finis [Djaka,2015]. Pour cette simulation, nous considérons un domaine périodique, discrétisé avec $128 \times 128 \times 128$ voxels (plus de 2 millions de voxels). Les paramètres de la simulation sont $c = 0.25$ et $\varepsilon_M = 0.2$. L'évolution de la norme de la densité de dislocation est reportée sur la figure 3.9 à diffférents instants, jusqu'à l'annihilation de la boucle. D'après l'expérience acquise au fil des simulations, nous avons observé que les paramètres du filtre exponentiel sont variables suivant la simulation effectuée. Pour un nombre de points de Fourier N donné, il est nécessaire de trouver une valeur optimale de ε_M, de telle sorte que les instabilités disparaissent tout en limitant en même temps l'étalement de la solution. Quand ε_M est choisi plus grand que la valeur optimale, des instabilités apparaissent dans la solution, et lorsqu'il est choisi plus petit, la solution est trop amortie. Le choix de la valeur de ε_M se voit très dépendant de N, mais aussi du nombre de Courant c (le pas de temps) et du profil initial de la densité de dislocation. Pour terminer, nous avons observé que la méthode spectrale est très performante en terme de temps de calcul, particulièrement pour les grands nombres de voxels et dans les simulations 3D. Le tableau 3.1 reporte le temps de calcul pour un seul pas de temps dans le cas de la simulation de la boucle 3D avec la présente approche spectrale et avec la méthode élément finis GLS utilisant des éléments linéaires tétraédriques et le solveur GMRES (Gradient Minimal Residual) dans le code FreeFem++ [Hecht,2012, Hecht,2017]. Les calculs ont été effectués sur un ordinateur portable et sur un seul processeur. L'approche spectrale est au moins 1300 fois plus rapide que la méthode éléments finis pour $N_{tot} = 128^3$. Dans ce même tableau, le temps de calcul pour $N_{tot} = 256^3$ et $N_{tot} = 512^3$ reste assez impressionnant pour l'approche spectrale. Les temps de calcul doivent être gigantesques avec la méthode éléments finis, mais l'insuffisance de mémoire vive de l'ordinateur ne permet même pas de lancer la simulation.

3.3 Implémentation dans un cadre élastoviscoplastique

Dans le cadre de la thèse de Konlam Sénam Djaka et en collaboration avec Ricardo Lebensohn (Los Alamos National Laboratory), nous avons initié l'implémentation de la mécanique des champs de dislocations mésoscopique (MFDM) dans le code EVPFFT (ElastoViscoPlastic FFT) développé à Los Alamos [Lebensohn,2012]. Cette formulation EVP-FFT est basée sur la plasticité cristalline conventionnelle et la résolution de l'équation d'équilibre des contraintes repose sur l'utilisation du schéma itératif Lagrangien augmenté développé par Michel, Moulinec et Suquet [Michel,2001]. Le développement majeur et non trivial (non présenté dans ce mémoire), consiste ici à étendre la formulation EVP-FFT de Lebensohn et al.



(a) (b)

FIGURE 3.10 – Distributions de GNDs (norme du tenseur de Nye) après 0.1% de déformation macroscopique. (a) : code EVPFFT. (b) : code EVPFFT avec équation de transport.

[Lebensohn,2012] à la théorie MFDM par l'implémentation de l'équation de transport des densités de dislocations [Djaka,2019] pour ajouter la contribution des densités de dislocations géométriquement nécessaires (GNDs) à la vitesse de déformation plastique. A l'échelle mésoscopique, l'équation de transport inclut la contribution des densités de dislocations statistiquement stockées, qui donne un terme de source/puits de densités de GNDs pour accommoder l'incompatibilité de la déformation plastique. Avec un tel modèle, il est possible d'étudier la formation de structures polarisées de dislocations dans les polycristaux, de voir les effets sur l'écrouissage, de simuler des effets de taille de grain, des chemins complexes de déformation... Comme tout premier exemple issu du mémoire de doctorat de Konlam Sénam Djaka, la figure 3.10 montre la simulation d'un agrégat polycristallin d'aluminium déformé en traction simple, avec le modèle EVPFFT et avec le nouveau modèle incluant le transport des densités de GNDs. Avec un modèle de plasticité cristalline, nous prédisons essentiellement l'accumulation de dislocations dans les joints de grains, ce qui se voit très bien sur la figure 3.10-a. Avec l'équation de transport, nous avons plutôt tendance à prédire des accumulations de dislocations contre les joints de grains (figure 3.10-b).

Chapitre 4

Synthèse et perspectives

4.1 Synthèse

La mécanique des champs de dislocations et notamment la mécanique des champs de désinclinaisons et de dislocations ont été au coeur de mes activités de recherche depuis mon recrutement comme chargé de recherches CNRS au laboratoire LEM3 en 2010. La première force de ces modèles est leur capacité à prédire les champs élastiques associés à n'importe quelle distribution de défauts, de la dislocation individuelle à des ensembles de dipôles de désinclinaisons et des empilements de boucles de dislocations autour d'inclusions. De plus, ces modèles sont totalement continus et les champs élastiques sont non singuliers au niveau des coeurs des défauts cristallins qui sont décrits par des étalements de densités de défauts appropriées. La deuxième force de ces modèles vient des équations de transport, qui permettent de prédire de façon réaliste le mouvement des défauts cristallins pour fournir de la déformation plastique et relaxer les champs élastiques. Les forces de ces modèles m'ont permis d'étudier majoritairement les structures de coeur des défauts cristallins, les dislocations et les joints de grains, ainsi que leurs mécanismes de plasticité, à une échelle de résolution nanométrique. Ces modèles se montrent assez prédictifs à cette échelle, et permettent de faire la transition d'une description physique, discrète et atomique des défauts cristallins, vers une description mécanique, continue et en terme de densités de défauts appropriées. Le développement de méthodes spectrales a également occupé une place importante dans mes recherches. Nous avons pu acquérir une expérience nouvelle dans ce domaine, et devenir plus familiers avec les aspects mécaniques, mathématiques, et les problèmes de stabilité et de précision numériques. Les méthodes développées permettent déjà d'utiliser nos modèles pour simuler des microstructures de dislocations et de désinclinaisons tridimensionnelles. Il serait bon de s'orienter vers une parallélisation des codes développés, où vers l'implémentation de nos modèles et méthodes dans des codes open source performants et existants, tels que Amitex par exemple (http ://www.maisondelasimulation.fr/projects/amitex/html/).

Concernant la mécanique des champs de dislocations, les principaux résultats sont :

- Calcul des champs élastiques non singuliers pour une distribution de densité de dislocation donnée.
- Application au problème de Peierls Nabarro et modélisation des structures de coeur des dislocations.
- Possibilité de couplages multi-physiques, exemple avec les milieux piézoélectriques.
- A l'échelle mésoscopique, prédiction de la formation de structures polarisées de dislocations, d'effets de taille, de trajets complexes de déformation.

Concernant la mécanique des champs de désinclinaisons, les originalités sont :

- Description plus riche de l'énergie élastique en considérant les courbures élastiques et les moments de contrainte.
- Transport des désinclinaisons. Le mouvement des désinclinaisons produits des courbures plastiques et donne un terme de nucléation/annihilation de dislocations.
- Les densités de désinclinaisons permettent de rendre compte des structures de coeur des joints de grains et peuvent être identifiées à l'échelle atomique.
- Importance des lois d'élasticité et du terme de source/puits de dislocations lors de la simulation de la migration des joints de grains.
- Globalement, la théorie se montre prédictive à l'échelle atomique (énergie des interfaces, facteur de cisaillement), même si elle n'est pas aussi prédictive que les simulations atomistiques. Elle est applicable assez facilement à divers matériaux (cuivre, fullerènes, olivine).

Concernant les méthodes spectrales développées, les principaux résultats sont :

- Calcul des champs élastiques en élasticité homogène et hétérogène.
- Traitement particulier du calcul des dérivées spatiales pour obtenir des solutions stables et précises.
- Résolution stable et précise de l'équation de transport des densités de dislocations, à l'aide d'une méthode filtrée.
- Implémentation de l'équation de transport dans un code EVPFFT, possibilité de simuler des agrégats polycristallins.
- Pour les calculs élastiques et l'équation de transport, les méthodes spectrales sont très efficaces numériquement, beaucoup plus rapides que les méthodes éléments finis testées à puissance de calcul égale.

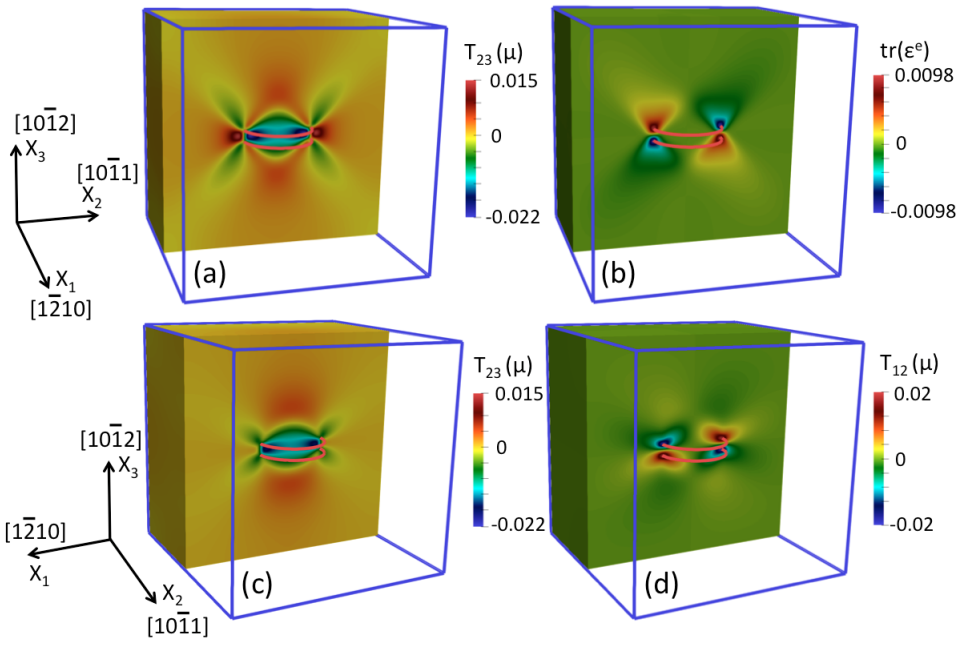


FIGURE 4.1 – Champs élastiques induits par une macle, modélisée par un dipôle de boucles de désinclinaisons discrètes [Capolungo,2019].

4.2 Désinclinaisons discrètes, désinclinaisons généralisées

La mécanique des champs de désinclinaisons présentée dans ce mémoire fournit une description continue des défauts d'interface, en termes de densités de désinclinaisons et de dislocations. Bien qu'elle se soit révélée prédictive, elle présente quelques limitations. Elle exige l'utilisation d'une résolution spatiale très fine, de l'ordre de l'échelle atomique et reste difficilement envisageable numériquement pour la simulation de microstructures 3D réalistes. Plus important, l'équation de transport des désinclinaisons (et des dislocations) n'est pas cristallographique. Les désinclinaisons étant des défauts d'interfaces, localisées dans les interfaces ou au niveau des jonctions d'interfaces, il est très probable qu'elles doivent se déplacer dans des plans cristallographiques bien définis, par exemple les plans d'interfaces. Pour introduire l'aspect cristallographique, autoriser la simulation de microstructures 3D réalistes, nous avons récemment initié avec Laurent Capolungo (Los Alamos National Laboratory) le développement d'un modèle de dynamique des désinclinaisons discrètes [Capolungo,2019]. Ce modèle est basé sur le modèle Discret-Continu [Lemarchand,2001], où les dislocations discrètes sont introduites dans un milieu continu au travers d'eigenstrains plastiques. Ici, il est possible d'introduire les désinclinaisons comme des eigencurvatures plastiques. Le modèle obtenu est résolu à l'aide d'un code numérique spectral. Des premiers résultats encourageants ont été

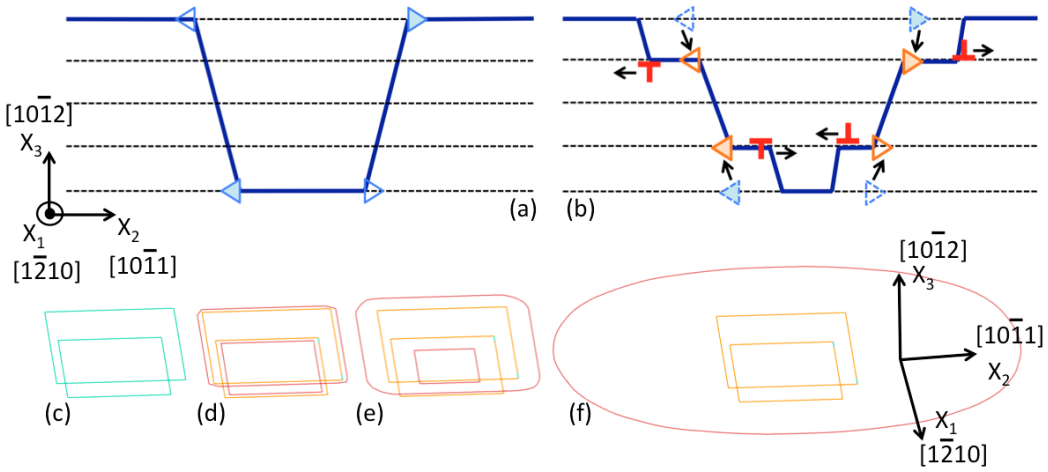


FIGURE 4.2 – Simulation de la nucléation de boucles de disconnections (marche plus vecteur de Burgers) par le mouvement de boucles de désinclinaisons, mécanisme possible pour la migration d'un joint de macle [Capolungo,2019].

obtenus (voir par exemple les figures 4.1 et 4.2) dans le cadre du maclage dans le magnésium. Parmi les résultats obtenus, nous voyons que les boucles de désinclinaisons permettent de modéliser des macles, pour des configurations relativement simples, et que le mouvement des désinclinaisons permet de suivre les champs élastiques (déformation et rotation) des macles lors de leur croissance. Nous avons aussi pu simuler un mécanisme de type disconnection (nucléation de marches et de vecteurs de Burgers) assisté par le mouvement des désinclinaisons, et proposer un scénario possible pour expliquer l'épaississement des macles. En collaboration avec Laurent Capolungo, il est prévu de poursuivre le développement et l'application de ce modèle à des cas spécifiques, comme les interactions entre macles, l'interaction des macles avec les joints de grains, l'effet des champs élastiques de macles sur la dynamique des dislocations discrètes et réciproquement, l'effet des champs élastiques de désinclinaisons d'interfaces sur la transmission des dislocations.

La théorie de mécanique des champs de désinclinaisons a été récemment étendue au concept de désinclinaisons généralisées [Acharya,2012]. Ces nouvelles densités de défauts sont illustrées sur la figure 4.3. Elles complètent les désinclinaisons classiques en introduisant une discontinuité de la déformation élastique, en plus de la rotation élastique. Ainsi, on obtient une discontinuité de la distorsion élastique. Du point de vue cinématique, ces densités de défauts sont reliées à l'incompatibilité du gradient de la distorsion élastique, ce qui demande le développement d'une théorie à gradients considérant les hyper-contraintes. Ces défauts généralisés sont potentiellement utiles pour la description mécanique des interfaces, notamment les hétéro-interfaces (pour les transformations de phase ou dans les matériaux multiphasés par exemple), les pointes de macles et de bandes en genoux (kink bands), et les disconnections. Les

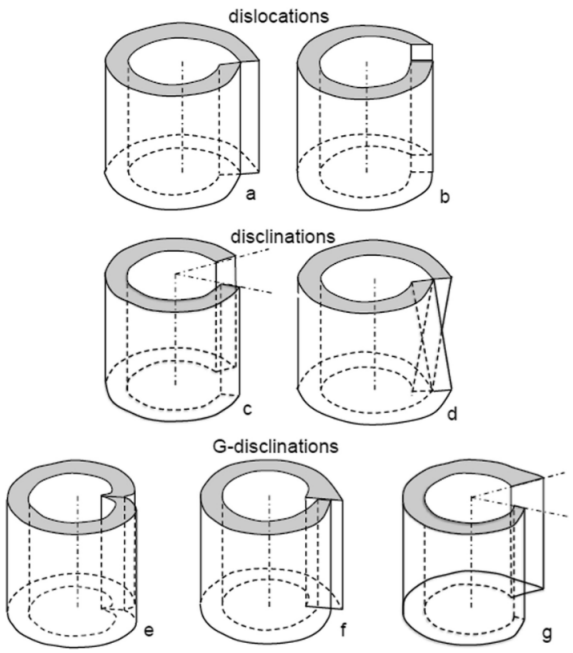


FIGURE 4.3 – Extension du concept de Volterra aux désinclinaisons généralisées. Les désinclinaisons généralisées complètent les désinclinaisons classiques en introduisant une discontinuité de la déformation élastique, en plus de la rotation. Figure extraite de [Berbenni,2014].

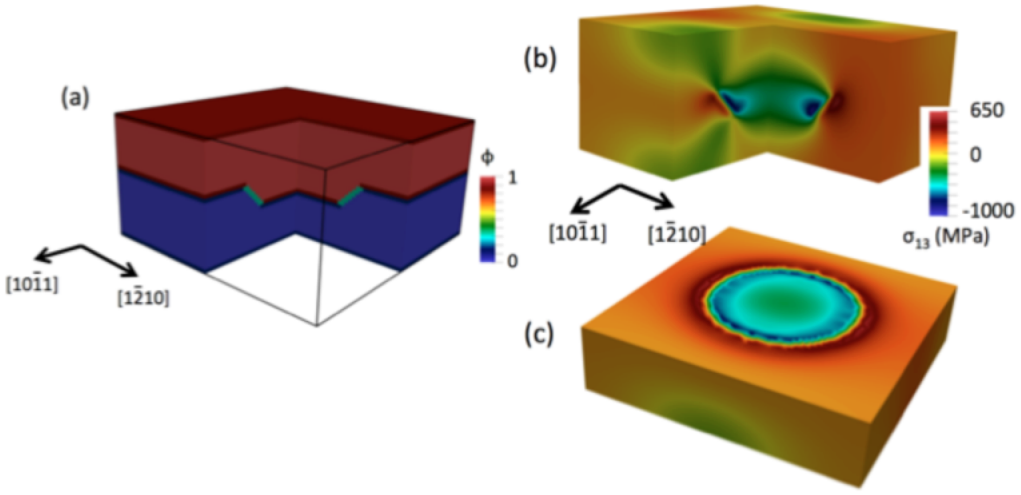


FIGURE 4.4 – Modélisation d'un cratère dans un joint de macle cohérent à l'aide d'un modèle champ de phase anisotrope. Distribution initiale de champ de phase et contrainte de cisaillement interne associée.

densités de désinclinaisons généralisées ont d'ailleurs été suggérées par calcul des incompatibilités élastiques dans de simples joints de flexion symétriques dans le cuivre [Sun,2016]. Cette théorie très fondamentale a un potentiel et mérite d'être analysée et développée. Il serait judicieux de commencer par trouver un cas d'étude approprié, par exemple la migration d'un joint de grain ou de phase, et de montrer ce qu'une description en terme de désinclinaisons généralisées apporte par rapport à une description en terme de désinclinaisons ou de dislocations. Les codes spectraux développés peuvent être étendus pour cette modélisation. Une collaboration existante est prévue avec le laboratoire UMET à Lille pour appliquer le concept des désinclinaisons généralisées aux mécanismes de plasticité par les joints de grains dans le manteau terrestre (olivine, MgO).

4.3 Modélisation champ de phase pour le maclage

De façon complémentaire au modèle de désinclinaisons discrètes [Capolungo,2019], la dynamique des interfaces de macles dans le magnésium peut être étudiée à l'aide d'une modélisation de type champ de phase [Clayton,2011, Heo,2011, Kondo,2014]. Des premiers travaux ont été initiés sur le maclage dans Mg, en collaboration avec Laurent Capolungo (Los Alamos National Laboratory) et Douglas Spearot (University of Florida). Le modèle champ de phase en cours de développement (voir figure 4.4 par exemple) peut être alimenté par des simulations avec le code de dynamique des désinclinaisons discrètes (champs élastiques, nucléation de disconnexions...), mais

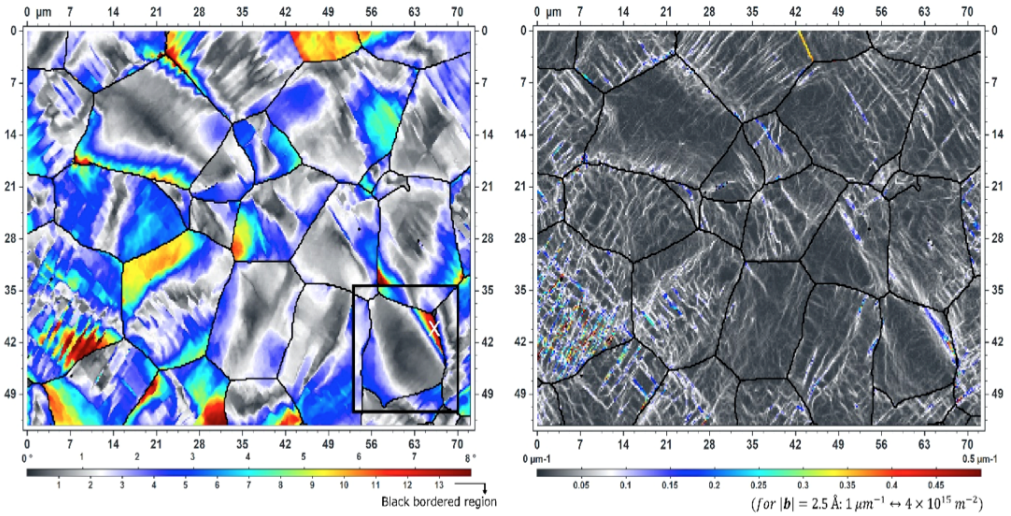


FIGURE 4.5 – Cartes de désorientation (à gauche) et de GNDs (norme du tenseur de Nye, à droite) obtenues par une nouvelle méthode de corrélation des clichés de Kikuchi, obtenus ici par EBSD dans un acier IF.

aussi par des simulations atomistiques (énergies et mobilités d'interfaces, énergies d'activation...). Il est prévu de développer un modèle anisotrope en termes d'énergies et de mobilités d'interfaces, afin de comprendre la cinétique de croissance des macles en 3D, et de voir les effets de température, de contrainte, les interactions avec d'autres défauts (dislocations extrinsèques, joints de grains). Le modèle en cours de développement est aussi implémenté dans un code spectral.

4.4 Synergie simulation/microscopie électronique

Dans le cadre de nouvelles collaborations au laboratoire LEM3 (Emmanuel Bouzy, Benoit Beausir, Antoine Guitton, Nabila Maloufi), des nouvelles études sont prévues, où il est prévu d'appliquer les modèles de dislocations et de désinclinaisons aux observations de défauts cristallins (dislocations, joints de grains) par microscopie électronique. Dans le cadre de la thèse en cours de Clément Ernould (directeur Emmanuel Bouzy, co-directeurs Benoit Beausir et moi-même), une méthode de corrélation d'images a été adaptée aux clichés de diffraction obtenus par EBSD ou par TKD (Transmission Kikuchi Diffraction) afin de dériver des cartes de rotations élastiques (et possiblement de déformations élastiques) avec une précision très grande et une résolution spatiale fine (TKD). A partir des cartes obtenues, il est par exemple possible d'estimer les densités de GNDs, qui peuvent alors directement alimenter un modèle de mécanique des champs de dislocations. La figure

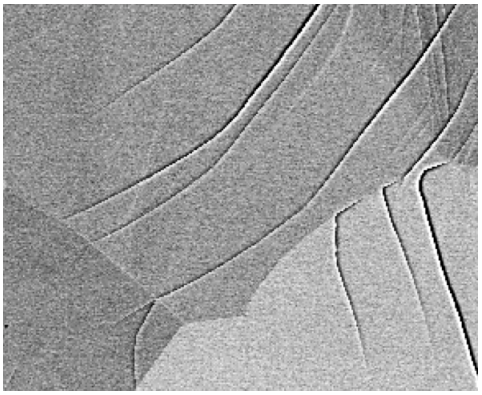


FIGURE 4.6 – Image ECCI d'un alliage de titane (courtoisie d'Antoine Guitton).

4.5 montre par exemple des cartes de désorientation et de GNDs obtenues pour un acier IF. Il serait intéressant pour commencer de comparer les champs élastiques obtenus par cette nouvelle méthode d'analyse des clichés de diffraction à ceux obtenus par simulation de mécanique des champs de dislocations avec les densités de GNDs issues des cartes expérimentales. Il est aussi prévu dans le cadre de la thèse de Clément Ernould, d'utiliser cette complémentarité microscopie / simulation pour étudier les mécanismes de formation et de propagation de bandes en genoux (kink bands) dans des alliages TiAl. L'autre technique de microscopie électronique considérée est l'ECCI (Electron Channeling Contrast Imaging). Cette méthode permet de caractériser les dislocations et les interfaces au niveau des surfaces des échantillons. Avec une telle technique, il est possible d'observer par exemple l'activation des systèmes de glissement dans les grains, ou encore les interactions entre dislocations et joints de grains, comme la transmission par exemple (voir par exemple la figure 4.6). Ce genre de données est précieux pour les modèles de plasticité polycristalline, et réciproquement. Il serait intéressant par exemple d'utiliser des observations par ECCI d'interactions entre dislocations et joints de grains pour valider ou pour établir des critères de transmission. Il est aussi possible d'améliorer les lois constitutives d'écoulement plastique pour prédire les bonnes activations de système de glissement.

4.5 Localisation dans les alliages d'aluminium

Durant le postdoctorat de Satyapriya Gupta financé par le centre de recherche de Constellium, le Labex DAMAS et la région Grand-Est, nous nous sommes intéressés aux phénomènes de localisation de la déformation plastique dans les alliages aéronautiques de type AlCuLiMg. Bien que ces alliages offrent un rapport résistance mécanique / poids exceptionnel, ils sont sujets à des phénomènes de localisation prématurée, néfastes en termes de ductilité et de ténacité. Cette tendance à la localisation

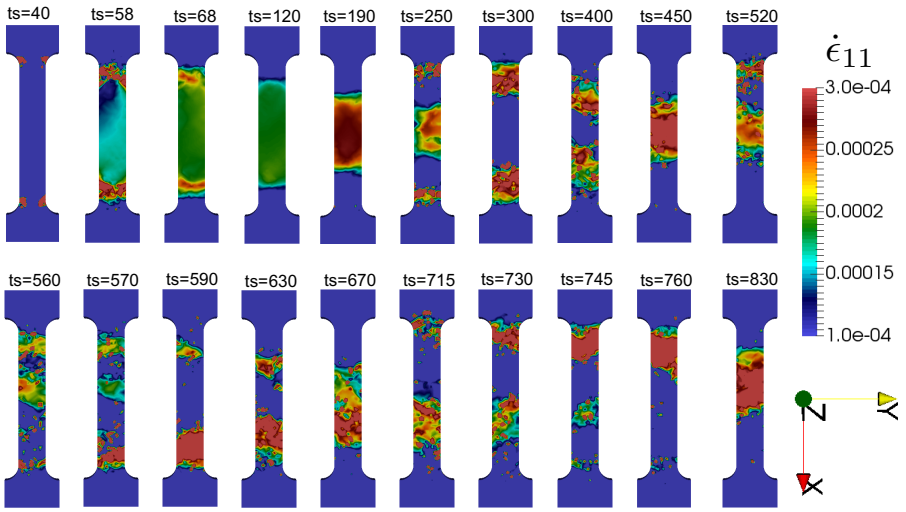


FIGURE 4.7 – Simulation numérique éléments finis, avec un modèle de plasticité cristalline incluant le vieillissement dynamique, de la propagation de bandes de déformation dans un échantillon de traction AlCuLiMg.

prématurée a été mise en évidence clairement par des expériences combinant laminographie à rayons X et corrélation d'images 3D [Morgeneyer,2014, Morgeneyer,2016]. Les simulations suggèrent assez clairement que ces problèmes de localisation sont liés au phénomène de vieillissement dynamique [Ren,2016]. Comme le montre la figure 4.7, nous avons développé un code éléments finis de plasticité cristalline qui inclut le phénomène de vieillissement dynamique. Nous sommes capables de reproduire la nucléation et la propagation de bandes de déformation assez complexes. Nous étudions actuellement les effets d'orientation cristalline, de couples d'orientations et des interactions élasto-plastiques entre grains sur les phénomènes de localisation dans les microstructures laminées. Nous souhaitons montrer qu'il existe des distributions d'orientations cristallines qui peuvent limiter les phénomènes de localisation induits par le vieillissement dynamique et maintenir une réponse mécanique élevée. A plus long terme, nous souhaitons introduire le durcissement par précipitation dans le code. En effet, des études expérimentales ont montré qu'une variété de précipités de taille nanométrique se forme lors des traitements thermomécaniques appliqués à ces alliages, et que certains d'entre eux semblent très favorables en termes de durcissement et d'homogénéisation de la déformation [Donnadieu,2011, Deschamps,2013, Araullo-Peters,2014, Dorin,2014a, Dorin,2014b, Dorin,2015]. Il semble donc intéressant de pouvoir développer un outil numérique permettant de combiner les effets de texture, de microstructure, de précipitation, de vieillissement dynamique, pour essayer de proposer des optimisations de matériaux en terme de localisation réduite. A plus long terme, il est aussi envisagé d'introduire des modèles d'endommagement.

Bibliographie

[Acharya,2001] A. Acharya, J. Mech. Phys. Solids **49**, 761 (2001).

[Acharya,2012] A. Acharya, C. Fressengeas, Int. J. Fract. **174**, 87 (2012).

[Admal,2018] N.C. Admal, G. Po, J. Marian, Int. J. Plasticity **106**, 1 (2018).

[Araullo-Peters,2014] V. Araullo-Peters, B. Gault, F. de Geuser, A. Deschamps, J. M. Cairney, Acta Mater. **66**, 199 (2014).

[Bachurin,2003] D.V. Bachurin, R.T. Murzaev, A.A. Nazarov, Phys. Met. Metall. **96**, 555 (2003).

[Barrales-Mora,2014] L.A. Barrales-Mora, J.-E. Brandenburg, D.A. Molodov, Acta Mater. **80**, 141 (2014).

[Barrales-Mora,2016] L.A. Barrales-Mora, D.A. Molodov, Acta Mater. **120**, 179 (2016).

[Barrett,2014] C.D. Barrett, H. El Kadiri, Acta Mater. **70**, 137 (2014).

[Beausir,2013] B. Beausir, C. Fressengeas, Int. J. Solids. Structures **50**, 137 (2013).

[Beers,2015] P.R.M. van Beers, V.G. Kouznetsova, M.G.D. Geers, M.A. Tschopp, D.L. McDowell, Acta Mater. **82**, 513 (2015).

[Ben-Saada,2017] M. Ben Saada, N. Gey, B. Beausir, X. Iltis, H. Mansour, N. Maloufi, Materials Characterization **133**, 112 (2017).

[Berbenni,2013] S. Berbenni, B. Paliwal, M. Cherkaoui, Int. J. Plasticity **44**, 68 (2013).

[Berbenni,2014] S. Berbenni, V. Taupin, K.S. Djaka, C. Fressengeas, Int. J. Solids Structures **51**, 4157 (2014).

[Beyerlein,2014] I.J. Beyerlein, J.R. Mayeur, S. Zheng, N.A. Mara, J. Wang, A. Misra, Proc. Nat. Acad. Sci. **111**, 4386 (2014).

[Brenner,2014] R. Brenner, A.J. Beaudoin, P. Suquet, A. Acharya, phil. Mag. **94**, 1764 (2014).

[Bilby,1955] B.A. Bilby, in Defects in crystalline solids. Report of the Conference of the International Union of Physics, Bristol, London : The Physical Society, 124 (1955).

[Bitzek,2008] E. Bitzek, P.M. Derlet, P.M. Anderson, H. Van Swygenhoven, Acta Mater. **56**, 4846 (2008).

[Bollman,1970] W. Bollmann, *Crystal defects and crystalline interfaces*, Springer-Verlag (1970).

[Bollman,1991] W. Bollmann, Mat. Sci. Eng. A **136**, 1 (1991).

[Bozhko,2014] S.I. Bozhko, V. Taupin, M. Lebyodkin, C. Fressengeas, E.A. Levchenko, K. Radikan, O. Lübben, V.N. Semenov, I.V. Shvets, Phys. Rev. B **90**, 214106 (2014).

[Burgers,1940] J.M. Burgers, Proc. Phys. Soc. **52**, 23 (1940).

[Cahn,2006] J.W. Cahn, Y. Mishin, A. Suzuki, Acta Mater. **54**, 4953 (2006).

[Cai,1992] W. Cai, D. Gottlieb, C. W. Shu, J. Numer. Anal. **29**, 905 (1992).

[Capolungo,2019] L. Capolungo, V. Taupin, Materials Theory **3**, 2 (2019).

[Carrez,2015] P. Carrez, J. Godet, P. Cordier, Comp. Mater. Sci. **103**, 250 (2015).

[Cherns,2002] D. Cherns, C.G. Gao, H. Mokhtari, J. Cai, F.A. Ponce, Phys. Stat. Sol. (b) **234**, 924 (2002).

[Clayton,2011] J.D. Clayton, J. Knap, Physica D **240**, 841 (2011).

[Cordier,2014] P. Cordier, S. Demouchy, B. Beausir, V. Taupin, F. Barou, C. Fressengeas, Nature **507**, 51 (2014).

[Cosserat,1909] E. Cosserat, F. Cosserat, *Théorie des corps déformables*, Hermann, Paris (1909).

[Couillard,2013] M. Couillard, G. Radtke, G.A. Botton, phil. Mag. **93**, 1250 (2013).

[Denoual,2004] C. Denoual, Phys. Rev. B **70**, 024106 (2004).

[Denoual,2007] C. Denoual, Comput. Methods Appl. Mech. Eng. **196**, 1915 (2007).

[Deschamps,2013] A. Deschamps, B. Decreus, F. D. Geuser, T. Dorin, M. Weyland, Acta Mater. **61**, 4010 (2013).

[Dewald,2007] M.P. Dewald, W. A. Curtin, phil. Mag. **87**, 4615 (2007).

[deWit,1970] R. deWit, in *Fundamental aspects of dislocation theory*, ed. by J.A. Simmons, R. deWit and R. Bullough Nat. Bur. Stand. (US), Spec. Publ. 317, **Vol. I**, 651 (1970).

[deWit,1973] R. deWit, J. Research Nat. Bur. Stand.-A. Phys. Chem. **77**, 607 (1973).

[Dingreville,2014] R. Dingreville, A. Hallil, S. Berbenni, J. Mech. Phys. Solids **72**, 40 (2014).

[Di Paola,2013] M. Di Paola, G. Failla, A. Pirrotta, A. Sofi, M. Zingales, Phil. Trans. R. Soc. A **371**, 20120433 (2013).

[Djaka,2015] K.S. Djaka, V. Taupin, S. Berbenni, C. Fressengeas, Modelling Sim. Mater. Sci. Eng. **23**, 065008 (2015).

[Djaka,2017] K.S. Djaka, A. Villani, V. Taupin, L. Capolungo, S. Berbenni, Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg. **315**, 921 (2017).

[Djaka,2019] K.S. Djaka, S. Berbenni, V. Taupin, R.A. Lebensohn, Int. J. Solids Structures, in Press (2019).

[Donnadieu,2011] P. Donnadieu, Y. Shao, F. D. Geuser, G. Botton, S. Lazar, M. Cheynet, M. de Boissieu, A. Deschamps, Acta Mater. **59**, 462 (2011).

[Dorin,2014a] T. Dorin, A. Deschamps, F. D. Geuser, C. Sigli, Acta Mater. **75**, 134 (2014).

[Dorin,2014b] T. Dorin, F. D. Geuser, W. Lefebvre, C. Sigli, A. Deschamps, Mater. Sci. Engrg : A **605**, 119 (2014).

[Dorin,2015] T. Dorin, A. Deschamps, F. D. Geuser, F. Robaut, Mater. Sci. Engrg : A **627**, 51 (2015).

[Dreyer,1999] W. Dreyer, W.H. Müller, J. Olschewski, Acta Mech. **136**, 171 (1999).

[Eisenlohr,2013] P. Eisenlohr, M. Diehl, R.A. Lebensohn, F. Roters, Int. J. Plasticity **46**, 37 (2013).

[Eringen,1966] A.C. Eringen, Int. J. Engng. Sci. **4**, 179 (1966).

[Eringen,1972] A.C. Eringen, D.G.B. Edelen, Int. J. Engng. Sci. **10**, 233 (1972).

[Eringen,1977a] A.C. Eringen, B.S. Kim, Crystal Lattice Defects **7**, 51 (1977).

[Eringen,1977b] A.C. Eringen, Technical Report No. 45, Civil Engng. Res. Report No. 77-SM-1, Princeton University (1977).

[Eringen,2002] A.C. Eringen, *Non local continuum field theories*, Springer, New York (2002).

[Farkas,2006] D. Farkas, A. Froseth, H. Van Swygenhoven,Scripta Mater. **55**, 695 (2006).

[Ferré,2007] D. Ferré, P. Carrez, P. Cordier, Phys. Earth Planetary Interiors **163**, 283 (2007).

[Frank,1950] F.C. Frank, in Symposium on The Plastic Deformation of Crystalline Solids, Mellon Institute, Pittsburgh, (NAVEXOS-P-834), 150 (1950).

[Fressengeas,2011] C. Fressengeas, V. Taupin, L. Capolungo, Int. J. Solids Structures **48**, 3499 (2011).

[Fressengeas,2014] C. Fressengeas, V. Taupin, L. Capolungo, Int. J. Solids Structures **51**, 1434 (2014).

[Frigo,1998] M. Frigo, S. G. Johnson, Processing of the International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing **3**, 1381 (1998).

[Gbemou,2016] K. Gbemou, V. Taupin, J.M. Raulot, C. Fressengeas, Int. J. Plasticity **82**, 241 (2016).

[Gertsman,1989] V.Y. Gertsman, A.A. Nazarov, A.E. Romanov, R.Z. Valiev, V.I. Vladimirov, Phil. Mag. A **59**, 1113 (1989).

[Gorkaya,2009] T. Gorkaya, D.A. Molodov, G. Gottstein, Acta Mater. **57**, 5396 (2009).

[Gottlieb,1992] D. Gottlieb, C. W. Shu, A. Solomonoff, H. Vandeven, J. Comput. Appl. Math. **43**, 81 (1992).

[Gottlieb,1997] D. Gottlieb, C. W. Shu, J. Num. Anal. **39**, 644 (1997).

[Gottlieb,2001] D. Gottlieb, J. Hesthaven, J. Comput. Appl. Math. **128**, 83 (2001).

[Gottstein,2010] G. Gottstein, L.S. Shvindlerman, *Grain boundary migration in metals, Thermodynamics, Kinetics, Applications*, CRC Press, Taylor and Francis group (2010).

[Gouriet,2014] K. Gouriet, P. Carrez, P. Cordier, Modelling Simul. Mater. Sci. Engrg. **22**, 025020 (2014).

[Gupta2018] S. Gupta, A.J. Beaudoin, J. Chevy, Mater. Sci. Engrg. **A 683**, 143 (2018).

[Hall,1951] E.O. Hall, Proc. Phys. Soc. London B **64**, 747 (1951).

[Han,2012] X. Han, E. Pan, J. Appl. Phys. **112**, 103501 (2012).

[Hansen,1998] P.J. Hansen, Y.E. Strausser, A.N. Erickson, E.J. Tarsa, P. Kozodoy, E.G. Brazel, J.P. Ibbetson, U. Mishra, V. Narayanamurti, S.P. DenBaars, J.S. Speck, Appl. Phys. Lett. **72**, 2247 (1998).

[Hartford,1998] J. Hartford, B. von Sydow, G. Wahnström, B.I. Lundqvist, Phys. Rev. B **58**, 2488 (1998).

[Hartley,2005] C.S. Hartley, Y. Mishin, Mater. Sci. Engrg. A **400-401**, 18 (2005).

[Hasson,1972] G. Hasson, J.Y Boos, I. Herbeuval, M. Biscondi, C. Goux, Surface Science **31**, 115 (1972).

[Hecht,2012] F. Hecht, J. Num. Math. **20**, 251 (2012).

[Hecht,2017] F. Hecht, O. Pironneau, A. Le Hyaric, K. Ohtsuka, FreeFem++, www.freefem.org/ff++/

[Heinisch,1998] H.L. Heinisch, R.G. Hoagland, R.J. Kurtz, J.P. Hirth, Scripta Mater. **39**, 451 (1998).

[Heo,2011] T.W. Heo, Y. Wang, S. Bhattacharya, X. Sun, S. Hu, L.-Q. Chen, Phil. Mag. Lett. **91**, 110 (2011).

[Hirth,1982] J.P. Hirth, J. Lothe, *Theory of Dislocations*, 2nd ed. Wiley, New York (1982).

[Hirth,1996] J.P. Hirth, R.C. Pond , Acta Mater. **44**, 4749 (1996).

[Hirth,2006] J.P. Hirth, R.C. Pond, J. Lothe, Acta Mater. **54**, 4237 (2006).

[Hull,2001] D. Hull, D.J. Bacon, *Introduction to Dislocations*, 4th ed. Butterworth-Heinemann (2001).

[Hunter,2014] A. Hunter, I.J. Beyerlein, Mater. Sci. Eng. A **600**, 200 (2014).

[Hytch,1998] M.J. Hÿtch, E. Snoeck, R. Kilaas, Ultramicroscopy **74**, 131 (1998).

[Hytch,2006] M.J. Hÿtch, J.-L. Putaux, J. Thibault, Phil. Mag. **86**, 4641 (2006).

[Im,1994] H.-J. Im, Y. Ding, J.P. Pelz, B. Heying, J.S. Speck, Phys. Rev. Lett. **87**, 106802 (2001).

[Joós,1994] B. Joós, Q. Ren, M.S. Duesbery, Phys. Rev. B **50**, 5890 (1994).

[Khater,2012] H.A. Khater, A. Serra, R.C. Pond, J.P. Hirth, Acta Mater. **60**, 2007 (2012).

[Kleman,2008] M. Kleman, J. Friedel, Rev. Modern Phys. **80**, 61 (2008).

[Knowles,1982] K.M. Knowles, Phil. Mag. **46**, 951 (1982).

[Kobelev,2001] N. P. Kobelev, R.K.Nikolaev, N.S. Sidorov, Y.M. Soifer, Phys. Solid State **43**, 2344 (2001).

[Kondo,2014] R. Kondo, Y. Tadano, K. Shizawa, Comput. Mater. Sci. **95**, 672 (2014).

[Kopriva,1987] D. A. Kopriva, J. Sci. Comput. **2**, 249 (1987).

[Koslowski,2002] M. Koslowski, A.M. Cuitino, M. Ortiz, J. Mech. Phys. Solids **50**, 2597 (2002).

[Kraych,2016] A. Kraych, P. Carrez, P. Hirel, E. Clouet, P. Cordier, Phys. Rev. B **93**, 014103 (2016).

[Kröner,1980] E. Kröner, in Physics of Defects, Ed. R. Balian et al., North Holland, Amsterdam, 218 (1980).

[Kubin,2013] L.P. Kubin, *Dislocations, mesoscale simulations and plastic flow*, Oxford series on materials modelling, Oxford University Press (2013).

[Kugaenko,2013] O.M. Kugaenko, S.S. Uvarova, V.S. Petrakov, O.A. Buzanov, V.N. Egorov, S.A. Sakharov, M.L. Pozdnyakov, Russian Mettallurgy **2013**, 286 (2013).

[Lazar,2003] M. Lazar, J. Physics A : Math. Gen. **36**, 1415 (2003).

[Lazar,2011] M. Lazar, E. Agiasofitou, Int. J. Eng. Science **49**, 1404 (2011).

[Lazar,2015] M. Lazar, G. Po, Eur. J. Mech. A/Solids **50** ,152 (2015).

[Lebensohn,2012] R.A. Lebensohn, A.K. Kanjarla, P. Eisenlohr, Int. J. Plasticity **32-33**, 59 (2012).

[Lemarchand,2001] C. Lemarchand, B. Devincre, L.P. Kubin, J. Mech. Phys. Solids **49**, 1969 (2001).

[Lester,1995] S.D. Lester, F.A. Ponce, M.G. Craford, D.A. Steigerwald, Appl. Phys. Lett. **66**, 1249 (1995).

[Li,1972] J.C.M. Li, Surface Science **31**, 12 (1972).

[Liu,2010] B. Liu, D. Raabe, F. Roters, P. Eisenlohr, R.A. Lebensohn, Modelling Sim. Mater. Sci. Engrg. **18**, 085005 (2010).

[Lu,2000] G. Lu, N. Kioussis, V.V. Bulatov, E. Kaxiras, Phys. Rev. B **62**, 3099 (2000).

[Maciejewski,2006] G. Maciejewski, S. Kret, P. Ruterana, J. Microscopy **223**, 212 (2006).

[Maday,1989] Y. Maday, E. Tadmor, J. Num. Anal. **26**, 854 (1989).

[Majda,1978] A. Majda, J. McDonough, S. Osher, Math.Comput. **32**, 1041 (1978).

[Mara,2008] N.A. Mara, D. Bhattacharyya, P. Dickerson, J.K. Baldwin, R.G. Hoagland, A. Misra, Material Research Highlight, LALP-08-048, Los Alamos National Laboratory (2008).

[Metsue,2010] A. Metsue, P. Carrez, C. Denoual, D. Mainprice, P. Cordier, Phys. Chem. Minerals **37**, 711 (2010).

[Michel,2001] J.C. Michel, H. Moulinec, P. Suquet, Int. J. Num. Meth. Engrg. **52**, 139 (2001).

[Mindlin,1962] R.D. Mindlin, H.F. Tiersten, Arch. Rat. Mech. Anal. **11**, 415 (1962).

[Mompiou,2009] F. Mompiou, D. Caillard, M. Legros, Acta Mater. **57**, 2198 (2009).

[Morgeneyer,2014] T. F. Morgeneyer, T. Taillandier-Thomas, L. Helfen, T. Baumbach, I. Sinclair, S. Roux, F. Hild, Acta Mater. **69**, 78 (2014).

[Morgeneyer,2016] T. F. Morgeneyer, T. Taillandier-Thomas, A. Buljac, L. Helfen, F. Hild, J. Mech. Phys. Solids **96**, 550 (2016).

[Moulinec,1994] H. Moulinec, P. Suquet, Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris II **318**, 1417 (1994).

[Moulinec,1998] H. Moulinec, P. Suquet, Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg. **157**, 69 (1998).

[Mura,1963] T. Mura, Phil. Mag. **89**, 843 (1963).

[Mura,1987] T. Mura, Micromechanics of defects in solids, Kluwer Academic Plublishers, dordrecht, edition, (1987).

[Murray,1991] R.A. Murray, in Proceedings of the 45th annual symposium on frequency control, IEEE Cat. No. 91CH2965-2 (1991).

[Murayama,2002] M. Murayama, J. M. Howe, H. Hidaka, S. Takaki, Science **295**, 2433 (2002).

[Nabarro,1947] F.R.N. Nabarro, Proc. Phys. Soc. **59**, 256 (1947).

[Nakamura,2011] M. Nakamura, in Handbook of Nanophysics : Clusters and Fullerenes, Edited by Klaus D. Sattler (CRC Press, Taylor & Francis Group), Boca Raton, London, New York, 37 (2011).

[Nye,1953] J.F. Nye, Acta Metall. **1**, 153 (1953).

[Pantleon,2008] W. Pantleon, Scripta Mater. **58**, 994 (2008).

[Peierls,1940] R.E. Peierls, Proc. Phys. Soc. London **52**, 34 (1940).

[Petch,1953] N.J. Petch, J. Iron Steel Inst. **174**, 25 (1953).

[Po,2014] G. Po, M. Lazar, D. Seif, N. Ghoniem, J. Mech. Phys. Solids **68**, 161 (2014).

[Pond,1994] R.C. Pond, J.P. Hirth, Solid State Phys. **47**, 287 (1994).

[Priester,1997] L. Priester, Interface Science **4**, 205 (1997).

[Priester,2001] L. Priester, Mater. Sci. Eng. A **309-310**, 430 (2001).

[Priester,2013] L. Priester, *Grain boundaries, from theory to engineering*, Springer Series in Material Science **172**, (2013).

[Rajabzadeh,2013] A. Rajabzadeh, M. Legros, N. Combe, F. Mompiou, D.A. Molodov, Phil. Mag. **93**, 1299 (2013).

[Read,1950] W.T. Read, W. Shockley, Phys. Rev. **78**, 275 (1950).

[Ren,2016] S. C. Ren, G. Rousselier, T. F. Morgeneyer, M. Mazière, S. Forest, Procedia Structural Integrity **2**, 3385 (2016).

[Rodney,2003] D. Rodney, Y. Le Bouar, A. Finel, Acta Mater. **51**, 17 (2003).

[Romanov,1992] A.E. Romanov, V.I. Vladimirov, in F.R.N. Nabarro (Ed.), Dislocations in Solids **9**, Elsevier, Amsterdam, 191 (1992).

[Romanov,2009] A.E. Romanov, A.L. Kolesnikova, Prog. Mat. Sci., **54**, 740 (2009).

[Rösner,2011] H. Rösner, C. Kübel, Y. Ivanisenko, L. Kurmanaeva, S.V. Divinski, M. Peterlechner, G. Wilde, Acta Mater. **59**, 7380 (2011).

[Roy,2005] A. Roy, A. Acharya, J. Mech. Phys. Solids **53**, 143 (2005).

[Roy,2006] A. Roy, A. Acharya, J. Mech. Phys. Sol. **54**, 1687 (2006).

[Schoeck,2012] G. Schoeck, Mater. Sci. Eng. A **333**, 390 (2012).

[Seif,2014] D. Seif, G. Po, M. Mrovec, M. Lazar, C. Elsässer, P. Gumbsch, Phys. Rev. B **91**, 184102 (2015).

[Shan,2004] Z. Shan, E.A. Stach, J.M.K. Wiezorek, J.A. Knapp, D.M. Follstaedt, S.X. Mao, Science **305**, 654 (2004).

[Shanthraj,2015] P. Shanthraj, P. Eisenlohr, M. Diehl, F. Roters, Int. J. Plasticity **66**, 31 (2015).

[Shen,2004] C. Shen, Y. Wang, Acta Mater. **52**, 683 (2004).

[Shi,1999] C. Shi, P.M. Asbeck, E.T. Yu, Appl. Phys. Lett. **74**, 573 (1999).

[Shih,1975] K.K. Shih, J.C.M. Li, Surface Science **50**, 109 (1975).

[Spearot,2005] D. Spearot, *Atomistic Calculations of Nanoscale Interface Behavior in FCC Metals*, Georgia Institute of Technology PhD thesis (2005).

[Spearot,2007] D.E. Spearot, M.A. Tschopp, K.I. Jacob, D.L. McDowell, Acta Mater. **55**, 705 (2007).

[Spearot,2008] D.E. Spearot, L. Capolungo, J. Qu, M. Cherkaoui, Comput. Mater. Sci. **42**, 57 (2008).

[Sun,2016] X.-Y. Sun, V. Taupin, C. Fressengeas, P. Cordier, Int. J. Plasticity **77**, 75 (2016).

[Sutton,1983] A.P. Sutton, V. Vitek, Phil. Trans. R. Soc. London A **309**, 1 (1983).

[Sutton,1995] A.P. Sutton, R.W. Baluffi, *Interfaces in crystalline materials*, Clarendon Press, Oxford (1995).

[Taupin,2007] V. Taupin, S. Varadhan, J. Chevy, C. Fressengeas, A.J. Beaudoin, M. Montagnat, P. Duval, Phys. Rev. Lett. **99**, 155507 (2007).

[Taupin,2012] V. Taupin, S. Berbenni, C. Fressengeas, Acta Mater. **60**, 664 (2012).

[Taupin,2013] V. Taupin, L. Capolungo, C. Fressengeas, A. Das, M. Upadhyay, J. Mech. Phys. Solids **61**, 370 (2013).

[Taupin,2014a] V. Taupin, C. Fressengeas, P. Ventura, M. Lebyodkin, V. Gornakov, J. Appl. Phys. **115**, 144902 (2014).

[Taupin,2014b] V. Taupin, L. Capolungo, C. Fressengeas, Int. J. Plasticity **53**, 179 (2014).

[Taupin,2016] V. Taupin, J. Chevy, C. Fressengeas, Int. J. Solids Structures **99**, 71 (2016).

[Taupin,2017] V. Taupin, K. Gbemou, C. Fressengeas, L. Capolungo, J. Mech. Phys. Solids **100**, 62 (2017).

[Trautt,2012] Z.T. Trautt, Y. Mishin, Acta Mater. **60**, 2407 (2012).

[Tschopp,2007] M.A. Tschopp, G.J. Tucker, D.L. McDowell, Acta Mater. **55**, 3959 (2007).

[Tschopp,2008a] M.A. Tschopp, D.E. Spearot, D.L. McDowell, in Dislocations in Solids **14**, Edited by J.P. Hirth, 43 (2008).

[Tschopp,2008b] M.A. Tschopp, G.J. Tucker, D.L. McDowell, Comp. Mater. Science **44**, 351 (2008).

[Tschopp,2008c] M.A. Tschopp, D.L. McDowell, Scripta Mater. **58**, 299 (2008).

[Tucker,2010a] G.J. Tucker, M.A. Tschopp, D.L. McDowell, Acta Mater. **58**, 6464 (2010).

[Tucker,2010b] G.J. Tucker, J.A. Zimmerman, D.L. McDowell, Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. **18**, 015002 (2010).

[Tucker,2012] G.J. Tucker, S. Tiwari, J.A. Zimmerman, D.L. McDowell, J. Mech. Phys. Solids **60**, 471 (2012).

[Upadhyay,2011] M. Upadhyay, L. Capolungo, V. Taupin, C. Fressengeas, Int. J. Solids. Structures **48**, 3176 (2011).

[Upadhyay,2013] M. Upadhyay, L. Capolungo, V. Taupin, C. Fressengeas, Phil. Mag. **93**, 794 (2013).

[Van Swygenhoven,2006] H. Van Swygenhoven, P.M. Derlet, A.G. Froseth, Acta Mater. **54**, 1975 (2006).

[Van Swygenhoven,2008] H. Van Swygenhoven, Mater. Sci. Eng. A **483-484**, 33 (2008).

[Varadhan,2006] S. Varadhan, A.J. Beaudoin, A. Acharya, C. Fressengeas, Modell. Sim. Mater. Sci. Engrg. **14**, 1 (2006).

[Vattré,2013] A.J. Vattré, M.J. Demkowicz, Acta Mater. **61**, 5172 (2013).

[Vattré,2014] A.J. Vattré, N. Abdolrahim, K. Kolluri, M.J. Demkowicz, Nature Sci. Reports **4**, 1 (2014).

[Vattré,2015] A.J. Vattré, M.J. Demkowicz, Acta Mater. **82**, 234 (2015).

[Vendeven,1991] H. Vendeven, J. Sci. Comput. **6**, 159 (1991).

[Volterra,1907] V. Volterra, *Sur l'équilibre des corps élastiques multiplement connexes*, Ann. Sci. Ecol. Norm. Sup. III **24** 401 (1907).

[Wang,2002] Y. Wang, M. Chen, F. Zhou, E. Ma, Nature **419**, 912 (2002).

[Wang,2004] Y.M. Wang, E. Ma, Mater. Sci. Eng. A **375-377**, 46 (2004).

[Wang,2008] J. Wang, R.G. Hoagland, J.P. Hirth, A. Misra, Acta Mater. **56**, 5685 (2008).

[Wang,2011] J. Wang, A. Misra, Current Opinion in Solid State and Materials Science **15**, 20 (2011).

[Wang,2014] J. Wang, H. Sehitoglu, H.J. Maier, Int. J. Plasticity **54**, 247 (2014).

[Warner,2006] D.H. Warner, F. Sansoz, J.F. Molinari, Int. J. Plast. **22**, 754 (2006).

[Willot,2015] F. Willot, Comptes Rendus Mécanique **343**, 232 (2015).

[Wills,1969] R.D. Baeta, K.H.G. Ashbee, The American Mineralogist **54**, 1551 (1969).

[Winning,2001] M. Winning, G. Gottstein, L. S. Shvindlerman, Acta mater. **49**, 211 (2001).

[Wu,1996] X.H. Wu, L.M. Brown, D. Kapolnek, S. Keller, B. Keller, S. P. DenBaars, J.S. Speck, J. Appl. Phys. **80**, 3228 (1996).

[Yang,2009] J.B. Yang, Y. Nagai, Z.G. Yang, M. Hasegawa, Acta Mater. **57**, 4874 (2009).

[Zeng,2016] Y. Zeng, A. Hunter, I.J. Beyerlein, M. Koslowski, Int. J. Plasticity **79**, 293 (2016).

[Zhang,2015] X. Zhang, A. Acharya, N.J. Walkington, J. Bielak, J. Mech. Phys. Solids **84**, 145 (2015).

[Zimmerman,2009] J.A. Zimmerman, D.J. Bammann, H. Gao, Int. J. Solids Structures **46**, 238 (2009).