HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Université de Lille 1
UFR Physique

Mémoire d'Habilitation à Diriger les Recherches
(discipline : Sciences Physiques)
présenté par

Emmanuel Clouet

Étude par Simulations Numériques de la Plasticité dans les Métaux

---

Date de soutenance : le 18 décembre 2013

devant le jury composé de :

Prof. Alexandre Legris	garant
Dr. Benoît Devincre	rapporteur
Dr. Laurent Pizzagalli	rapporteur
Prof. David Rodney	rapporteur
Dr. Yann Le Bouar	examinateur
Dr. Daniel Caillard	examinateur

n° d'ordre : 41271

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Table des matières

Préambule **1**

1 Simulation à l'échelle atomique des dislocations **5**
1.1 Dislocations et conditions aux limites 5
1.1.1 Agrégat à bords fixes 6
1.1.2 Agrégat à bords flexibles 8
1.1.3 Dipôle en conditions aux limites tri-périodiques 9
1.1.4 Dislocation en conditions aux limites semi-périodiques 11
1.2 Dislocation et théorie élastique 12

2 Énergie élastique, tractions de cœur et énergie de cœur **15**
2.1 Énergie élastique d'une dislocation 16
2.1.1 Dipôle de dislocations 16
2.1.2 Dislocation isolée 18
2.1.3 Énergie élastique : variable d'état 19
2.1.4 Théorie élastique anisotrope 20
2.2 Énergie de cœur 21
2.2.1 La dislocation coin dans le fer 22
2.2.2 La dislocation vis dans le zirconium 24
2.3 Conclusion 25

3 Propriétés de cœur des dislocations mixtes dans le fer **27**
3.1 Système de glissement $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ dans les métaux cubiques centrés 28
3.1.1 Brève étude bibliographique 28
3.1.2 Cristallographie 30
3.2 Énergie de cœur 31
3.3 Barrières de Peierls 33
3.4 Contrainte de Peierls 38
3.5 Du potentiel à la contrainte de Peierls 40
3.6 Conclusion et perspectives 42

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

4 Dilatation de cœur de la dislocation vis dans le fer **45**
4.1 Énergie de cœur des différentes configurations 46
4.2 Champ de dilatation du cœur 48
4.3 Origine et conséquences du champ de cœur 53

5 La dislocation vis dans le zirconium **55**
5.1 Faute d'empilement 56
5.2 Structure de cœur de la dislocation vis 59
5.3 Potentiel de Peierls 60
5.4 Perspectives 62

6 Interaction dislocation - défaut ponctuel **65**
6.1 Modélisation élastique 66
6.2 Dislocation - lacune 68
6.3 Dislocation - interstitiel 70
6.4 Conclusion et perspectives 73

7 Absorption de lacunes par les dislocations **75**
7.1 Dislocation crantée 75
7.2 Vitesse de montée des dislocations 79
7.2.1 Loi de mobilité en montée 79
7.2.2 Validation à l'échelle atomique 81
7.3 Conclusions et perspectives 82

8 Simulations de dynamique des dislocations avec montée **85**
8.1 Montée par diffusion en volume 86
8.2 Montée conservative 87
8.3 Perspectives 89

Conclusion et perspectives **91**

A Énergie de cœur et simulations de dynamique des dislocations **95**

B Énergie de formation d'un décrochement **99**
B.1 Décrochements et rayons de cœur 99
B.2 Décrochements et conditions aux limites périodiques 101

C Potentiel de Peierls et contrainte appliquée **105**
C.1 Méthode 105
C.2 Dislocation vis 107
C.3 Dislocation mixte $[11\bar{1}]$ 111

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

D Défaut ponctuel en élasticité **115**
D.1 Défaut ponctuel non polarisable 115
D.1.1 Dipôle élastique 115
D.1.2 Inclusion d'Eshelby 117
D.1.3 Obtention du dipôle élastique 118
D.2 Défaut ponctuel polarisable 119
D.2.1 Polarisabilité d'un dipôle élastique 119
D.2.2 Inhomogénéité d'Eshelby 120

Bibliographie **125**

Curriculum vitæ **141**

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

TABLE DES MATIÈRES

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Préambule

Ce mémoire décrit mes activités de recherche depuis la fin de ma thèse en 2004. Celles-ci se sont déroulées au Service de Recherches de Métallurgie Physique (SRMP) du CEA Saclay avec également une période de mise à disposition de deux ans dans l'équipe Métallurgie Physique et Génie des Matériaux de l'Unité Matériaux et Transformations (UMET, Univ. Lille 1).

Dans la continuité de ma thèse, j'ai tout d'abord travaillé sur la modélisation des cinétiques de précipitation en m'attachant à effectuer le changement d'échelle entre les simulations atomiques et les microstructures de précipitation qu'il est possible de caractériser expérimentalement (observations en microscopie électronique à transmission, mesure de résistivité électrique, ...). Ce travail de modélisation reposant sur la dynamique d'amas n'est pas repris dans ce manuscrit mais est décrit dans les articles [1, 2] ainsi que dans une contribution [3] à un volume de l'ASM Handbook. La plupart de mes travaux se sont ensuite concentrés sur l'étude du comportement plastique des métaux par une modélisation des propriétés des dislocations.

Le comportement plastique des matériaux cristallins est principalement régi par les dislocations. Si la théorie élastique parvient parfaitement à modéliser nombre de leurs propriétés [4], notamment les interactions à longue distance, le cœur des dislocations joue également un rôle important. Ainsi la structure de cœur des dislocations est un élément déterminant du plan de glissement et la friction de réseau (barrière et contrainte de Peierls) est un exemple de propriété clef, pilotée par le cœur, ne pouvant être abordée par l'élasticité. Bien entendu, certaines techniques expérimentales, telle que la microscopie électronique à haute résolution, permettent d'accéder aux propriétés de cœur des dislocations. Cependant, ces caractérisations expérimentales, souvent difficiles à mettre en œuvre, ne sont pas toujours possibles. Petit à petit, les simulations atomiques se sont donc révélées être un outil complémentaire pour l'étude des dislocations, autorisant une modélisation là où la théorie élastique ne s'applique plus. Ces mêmes simulations atomiques permettent de décrire les mécanismes élémentaires de la plasticité, telles que les réactions entre dislocations, sans postuler a priori ces mécanismes.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Pour passer des propriétés de la dislocation isolée au comportement plastique d'un volume élémentaire représentatif du monocristal, un changement d'échelle est nécessaire. La Dynamique des Dislocations (DD), en modélisant l'évolution d'une population de dislocations, constitue alors l'outil de simulation adéquat. De telles simulations reposent sur une description des interactions élastiques entre dislocations et utilisent des règles constitutives permettant une description à l'échelle mésoscopique des propriétés de cœur des dislocations telles que leur mobilité, se nourrissant ainsi des informations acquises à l'échelle atomique.

Au cours de mes travaux, ces différents outils de simulation ont été utilisés pour étudier la plasticité dans les métaux servant de matériaux de structure, et plus particulièrement les métaux d'intérêt pour l'industrie nucléaire.

Dans les alliages ferritiques, utilisés dans les réacteurs à eau pressurisée (REP) pour la cuve, ou les alliages de zirconium, utilisés dans ces mêmes REP pour la gaine et les assemblages de combustible, la plasticité est contrôlée à basse température par le glissement des dislocations vis. Les simulations atomiques permettent aujourd'hui d'envisager d'avoir une description quantitative des mécanismes élémentaires mis en jeu au cours de ce glissement (description de l'activation thermique, de l'influence de l'état de contrainte, ...). Ces simulations atomiques, notamment les calculs ab initio, ont donc été utilisées pour caractériser les propriétés de cœur des dislocations dans ces deux métaux de transition, le fer et le zirconium. Ceci s'est accompagné d'un travail de développement en théorie élastique afin de construire une approche quantitative apte à modéliser les dislocations.

À haute température, les mouvements de dislocation autres que le glissement simple deviennent importants pour comprendre le développement de la déformation plastique. La montée des dislocations, correspondant à un déplacement des dislocations à composante coin dans une direction perpendiculaire à leur plan de glissement, est, avec le glissement dévié, un de ces mécanismes opérant à haute température. Une étude à différentes échelles des mécanismes mis en jeu au cours de la montée des dislocations a été entreprise dans l'optique de prendre pleinement en compte ce mécanisme dans des simulations de DD, et par conséquent mieux modéliser la déformation à chaud.

Ce mémoire décrit tout d'abord les différentes méthodes de simulation atomique adaptées à l'étude des dislocations, en mettant l'accent sur celles compatibles avec des calculs ab initio (chap. 1). Nous montrons ensuite qu'il est possible, via une définition rigoureuse de l'énergie élastique, d'extraire de ces simulations atomiques l'énergie de cœur d'une dislocation et d'en étudier donc les variations, en particulier la variation ayant lieu au cours du glissement et responsable de la friction de réseau (chap. 2). L'approche atomique

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

ainsi développée est utilisée pour étudier les propriétés de cœur des dislocations dans le fer (chap. 3 et 4) et dans le zirconium (chap. 5). Nous étudions ensuite l'interaction d'une dislocation avec un défaut ponctuel (lacune ou atome de soluté) afin de dégager les ingrédients minimaux permettant de modéliser une telle interaction (chap. 6). L'étude porte enfin sur la montée des dislocations, tout d'abord à l'échelle atomique (chap. 7), avant de voir comment cette montée peut être prise en compte dans des simulations de DD (chap. 8).

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Préambule

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Chapitre 1

Simulation à l'échelle atomique des dislocations

Nous décrivons dans ce chapitre les aspect spécifiques des simulations atomiques permettant d'étudier les propriétés des dislocations. Nous nous intéressons plus particulièrement à la dislocation rectiligne infinie et l'échelle de modélisation à laquelle nous nous plaçons est celle de la dislocation isolée. Le but est principalement de développer une approche de modélisation compatible avec les calculs ab initio, afin d'utiliser ensuite ces calculs pour étudier les dislocations. Les propriétés des dislocations que nous souhaitons étudier in fine sont :

- les structures de cœur (description par exemple d'éventuels étalements de la dislocation dans des plans cristallographiques particuliers),
- les énergies de cœur, et plus particulièrement les différences d'énergie de cœur lorsque plusieurs configurations sont possibles pour une dislocation,
- les barrières énergétiques que la dislocation doit surmonter pour se mettre en mouvement, en particulier la barrière de Peierls dans le cas du glissement simple,
- la modification par des impuretés de la structure de cœur de la dislocation et les énergies d'interaction...

Les outils de modélisation élastique allant de paire avec ces simulations atomiques sont également brièvement décrits à la fin de ce chapitre.

1.1 Dislocations et conditions aux limites

Les techniques de simulations atomiques, que l'énergie soit obtenue par calcul ab initio ou à l'aide d'un potentiel empirique, nécessitent généralement des conditions aux limites particulières pour simuler les dislocations.

Tout d'abord, il est préférable d'utiliser des conditions aux limites pé-

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

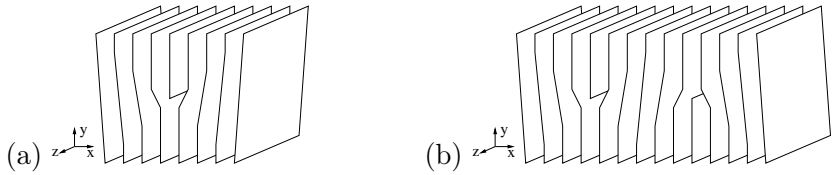


FIGURE 1.1 – Représentation schématique (a) d'une dislocation coin isolée et (b) d'un dipôle de dislocations coin. Un problème de raccordement des plans atomiques apparaît sur les bords de la boîte de simulation dans le cas (a).

riodiques dans les trois dimensions pour modéliser les solides. Ce type de conditions aux limites permet de ne pas introduire de surfaces dans le système qui, de part le faible volume qui peut être simulé, risquent de fortement influencer les propriétés que l'on souhaite étudier, masquant ainsi les réelles propriétés de volume du matériau. Malheureusement, il n'est pas possible d'avoir une boîte de simulation ne contenant qu'une seule dislocation avec des conditions aux limites tri-périodiques. Cela apparaît clairement sur la Fig. 1.1(a) représentant une dislocation coin où on voit que le demi-plan supplémentaire introduit pour créer la dislocation empêche de raccorder périodiquement la boîte de simulation dans la direction y sans créer un autre défaut. Ce problème n'est pas spécifique à la modélisation d'une dislocation coin. Pour que l'application de conditions aux limites tri-périodiques soit possible, il faut qu'un circuit de Burgers réalisé sur l'ensemble de la boîte conduise à un vecteur nul, comme sur la Fig. 1.1(b).

Une autre caractéristique des dislocations qu'il est nécessaire de prendre en compte dans les simulations atomiques est leur champ élastique à longue distance. En effet, le déplacement élastique induit par une dislocation varie en $\ln(r)$, où r est la distance à la ligne de dislocation [4]. Ce champ élastique ne s'annule donc pas à longue distance, et doit être pris en compte dans le choix des conditions aux limites des simulations atomiques.

Différentes méthodes de simulations atomiques ont été développées pour répondre à ces problèmes de conditions aux limites posés par les dislocations. Nous les décrivons brièvement afin de souligner les avantages et inconvénients de chaque méthode, et justifier par la suite le choix de la méthode retenue pour chaque cas étudié.

1.1.1 Agrégat à bords fixes

La technique la plus simple à mettre en œuvre pour étudier une dislocation rectiligne par simulation atomique consiste à utiliser un cylindre de longueur infinie. La dislocation est placée au centre du cylindre, la ligne de dislocation correspondant à l'axe du cylindre (Fig. 1.2a). Celle-ci est créée

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

en imposant sur tous les atomes le champ de déplacement de Volterra de la théorie élastique anisotrope. Des conditions aux limites périodiques sont imposées seulement dans la direction de la ligne de dislocation, suivant z sur la figure 1.2a. Les atomes à la surface du cylindre sont maintenus fixes, dans la position prédite par la théorie élastique (région (2) sur la Fig. 1.2a), tandis que les atomes à l'intérieur du cylindre sont relaxés de façon à annuler les forces atomiques (région (1)). L'épaisseur d de la région (2) doit être choisie suffisamment grande pour que les atomes à l'intérieur dans la région (1) n'interagissent pas avec le vide à l'extérieur du cylindre. Cette méthode permet donc théoriquement de simuler une dislocation isolée dans un cristal infini.

FIGURE 1.2 – Représentation schématique de la boîte de simulation utilisée pour modéliser une dislocation rectiligne dans l'approche agrégat (a) avec des bords fixes, (b) avec des bords flexibles.

Cette méthode présente cependant un certain nombre d'inconvénients. Tout d'abord elle suppose que le champ élastique créé par la dislocation est uniquement donné par la solution de Volterra calculée en élasticité linéaire. Ceci n'est vrai qu'au premier ordre : les effets liés au cœur de la dislocation, comme une dissociation en partielles, un possible étalement ou tout simplement sa structure atomique, ainsi que l'anharmonicité du matériau entraînent un champ élastique supplémentaire. Ce champ de cœur décroît plus rapidement que le champ de Volterra, mais si la boîte de simulation n'est pas suffisamment grande, il n'est pas forcément négligeable dans la région (2) et il faudrait donc en tenir compte pour fixer les atomes.

L'autre point faible de la méthode tient au fait que les atomes du bord (région (2)) sont fixés en supposant la dislocation à l'origine. Si la dislocation se déplace au cours de la simulation, les conditions aux limites ne seront plus compatibles avec la position de la dislocation. C'est le cas en particulier si on utilise cette méthode pour calculer la contrainte de Peierls. À mesure qu'une contrainte, ou une déformation, est appliquée sur la boîte de simulation, la dislocation sort du fond de sa vallée de Peierls et la position des atomes du bord ne correspond plus à la position de la dislocation. Ceci entraîne une contrainte supplémentaire s'opposant au mouvement de la dislocation. Au final, la contrainte de Peierls obtenue avec ces conditions aux limites est

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

forcément surestimée [5].

En pratique, on parvient généralement à atteindre des tailles de boîte suffisamment grandes avec les potentiels empiriques pour que ces artefacts deviennent négligeables, mais le problème demeure crucial avec les calculs ab initio.

1.1.2 Agrégat à bords flexibles

Les artefacts liés aux bords fixes de la méthode précédente peuvent être supprimés en suivant l'approche proposée par Sinclair *et al.* [6]. Pour cela, on utilise la théorie du solide harmonique, et plus particulièrement les fonctions de Green de réseau $G_{ij}(\vec{r})$. Ces fonctions permettent d'obtenir le déplacement $\vec{u}$ en un point $\vec{r}$ créé par une force $\vec{F}$ à l'origine :

$$u_i(\vec{r}) = G_{ij}(\vec{r})F_j. \tag{1.1}$$

Ces fonctions peuvent être obtenues par inversion des matrices de constantes de force [7], ou bien calculées initialement dans le cristal parfait et tabulées [8]. La théorie élastique permet également de les calculer dans la limite $r \to \infty$ à partir des seules constantes élastiques (fonctions de Green élastiques) [9].

On utilise la même géométrie d'agrégat que précédemment, mais le cylindre est désormais divisé en trois zones (Fig. 1.2b). Dans la zone (1), les atomes sont relaxés jusqu'à ce que leurs forces soient nulles tandis que les atomes des zones (2) et (3) sont maintenus fixes. À la fin de cette étape, des forces sont apparues dans la zone (2), traduisant le fait que les conditions aux limites ne sont pas exactement compatibles avec le champ élastique de la dislocation. On utilise alors les fonctions de Green pour déplacer les atomes dans l'ensemble du cylindre en fonction des forces de la zone (2). Ceci a pour effet d'annuler ces forces. L'ensemble de ces opérations est ensuite réitéré [1] jusqu'à ce que les forces s'annulent complètement dans les zones (1) et (2). La zone (3) sert de tampon afin que les forces apparaissant dans la zone (2) soient uniquement dues à la présence de la dislocation et ne soient pas perturbées par la présence d'une surface extérieure.

Cette méthode modélise donc à l'échelle atomique une dislocation isolée dans un cristal infini en prenant correctement en compte la réponse du continuum élastique. Elle permet d'étudier les cœurs de dislocation et de calculer précisément les contraintes de Peierls avec un nombre limité d'atomes généralement compatible avec les calculs ab initio [10, 11].

Si les conditions de bords flexibles permettent de correctement traiter le champ élastique de la dislocation, d'autres problèmes liés à la présence d'une surface peuvent persister dans ces méthodes d'agrégat, notamment lorsqu'elles sont utilisées dans des calculs ab initio. Ainsi, l'interaction des

1. Ce cycle autocohérent est nécessaire car les fonctions de Green utilisées sont celles du cristal parfait et ne font donc qu'approximer celles du cristal disloqué.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

atomes de surface avec le vide peut perturber la structure électronique, introduisant par exemple de nouvelles bandes dans le *gap* d'un semi-conducteur. En outre, dans les calculs ab initio, le potentiel interatomique ne possède pas de rayon de coupure. Il devient dès lors impossible de séparer la contribution énergétique de la surface de celle de la dislocation, ce qui exclut le calcul ab initio de grandeurs énergétiques comme l'énergie de cœur de la dislocation. Il n'est donc pas possible d'avoir accès avec cette méthode à des informations telles que les barrières énergétiques s'opposant au mouvement de la dislocation (barrière de Peierls pour le glissement simple par exemple). Cette restriction propre au calcul ab initio pourrait être levée avec le développement de méthodes [12] permettant de projeter localement l'énergie et donc de définir l'énergie d'un défaut. Cependant, l'application de ces méthodes à l'étude des dislocations reste encore à faire.

Soulignons enfin qu'il s'agit avant tout d'une méthode de statique moléculaire permettant d'étudier une dislocation isolée à 0 K, et que la méthode est peu adaptée à des configurations plus complexes qu'une seule dislocation ainsi qu'à des études dynamiques à température non nulle.

1.1.3 Dipôle en conditions aux limites tri-périodiques

Pour pouvoir complètement s'affranchir des effets de surface et utiliser des conditions aux limites périodiques dans les trois directions, il est nécessaire d'introduire un dipôle de dislocations dans la boîte de simulation. On modélise ainsi un réseau bi-périodique de dislocations (Fig. 1.3).

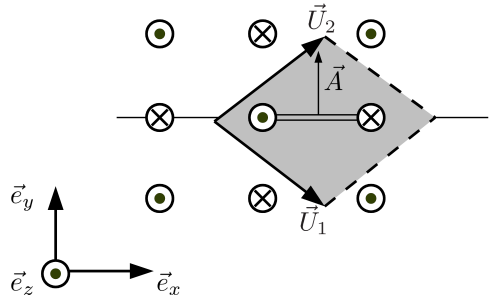


FIGURE 1.3 – Dipôles de dislocations en conditions aux limites périodiques. $\vec{A}$ est le vecteur surface définissant la coupe du dipôle. $\vec{U}_1$ et $\vec{U}_2$ sont les vecteurs de périodicité de la cellule.

Plusieurs arrangements périodiques de dislocations peuvent être utilisés. Néanmoins, l'arrangement dit quadripolaire, tel que celui représenté sur la figure 1.3, présente des avantages. Il se caractérise par le fait que le vecteur séparant les deux dislocations de signe opposé vaut $1/2\,(\vec{U}_1 + \vec{U}_2)$, $\vec{U}_1$ et $\vec{U}_2$

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

étant les vecteurs de périodicité de la cellule de simulation dans le plan orthogonal à la ligne de dislocation. Ainsi, chaque dislocation est un centre de symétrie du réseau périodique : plaçant arbitrairement l'origine au centre d'une dislocation, si une dislocation de vecteur de Burgers $\vec{b}$ se trouve en $\vec{r}$, une dislocation de vecteur de Burgers $\vec{b}$ se trouve également en $-\vec{r}$, si bien que la contrainte du champ élastique de Volterra créé par chacune de ces deux dislocations se compense exactement à l'origine. Il en résulte que cet arrangement quadripolaire du réseau périodique minimise les interactions entre dislocations. Il est en général l'arrangement à privilégier dans les simulations atomiques, en particulier pour les calculs ab initio, comme nous le verrons au chapitre 4 pour la dislocation vis dans le fer.

L'avantage des conditions aux limites tri-périodiques réside dans l'absence de surface. Toute l'énergie d'excès calculée par simulation atomique est donc due à la présence des dislocations dans la boîte de simulation. Une part de cette énergie provient de l'interaction élastique entre les deux dislocations composant le dipôle, ainsi qu'avec l'ensemble de leurs images périodiques. Comme nous le verrons au §1.2, la théorie élastique des dislocations peut être utilisée pour calculer cette contribution élastique à l'énergie d'excès, et en déduire ensuite les propriétés intrinsèques des dislocations comme leur énergie de cœur.

On peut montrer [13] que la contrainte homogène σ_{ij} s'exerçant sur la boîte de simulation pour une déformation totale imposée ε_{kl} est donnée par

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \left(\varepsilon_{kl} - \varepsilon^0_{kl} \right), \tag{1.2}$$

où C_{ijkl} est le tenseur des constantes élastiques. ε^0_{kl} est la déformation plastique nécessaire à la création du dipôle de dislocations. Pour un dipôle de vecteurs de Burgers $\vec{b}$ et surface de coupe $\vec{A}$ (Fig. 1.3), cette déformation plastique s'écrit

$$\varepsilon^0_{kl} = -\frac{b_k A_l + b_l A_k}{2S}, \tag{1.3}$$

S étant la surface de la boîte de simulation perpendiculairement à la ligne de dislocation ($S = |(\vec{U}_1 \times \vec{U}_2) \cdot \vec{e}_z|$ sur la figure 1.3).

L'équation 1.2 permet donc de déterminer quelle déformation ε_{kl} imposée à la boîte de simulation pour obtenir une contrainte donnée. En particulier, pour effectuer des simulations à contrainte nulle, on impose une déformation venant annuler la déformation plastique : $\varepsilon_{kl} = -\varepsilon^0_{kl}$.

Lorsque des variations de contrainte sont observées dans nos simulations atomiques, cette même équation pourra être utilisée pour relier ces variations de contrainte à des variations du vecteur coupe $\vec{A}$, et donc à des variations de la position des dislocations. En effet, si on observe une contrainte σ_{ij} dans la boîte de simulation pour une déformation imposée ε_{kl}, on en déduit la déformation plastique

$$\varepsilon^0_{kl} = \varepsilon_{kl} - S_{klij}\sigma_{ij}, \tag{1.4}$$

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

les complaisances élastiques S_{klij} étant l'inverse du tenseur des constantes élastiques.[2] Le vecteur coupe $\vec{A}$ du dipôle de dislocations se déduit ensuite de cette déformation plastique grâce à

$$A_1 = -\frac{2S}{b}\left(\varepsilon^0_{1l} b_l - \frac{b_1}{2b^2} b_k \varepsilon^0_{kl} b_l\right)$$
$$A_2 = -\frac{2S}{b}\left(\varepsilon^0_{2l} b_l - \frac{b_2}{2b^2} b_k \varepsilon^0_{kl} b_l\right).$$

Ce vecteur $\vec{A}$ a pour coordonnée $(y^1_{\mathrm{D}} - y^2_{\mathrm{D}}, x^2_{\mathrm{D}} - x^1_{\mathrm{D}})$, avec $(x^1_{\mathrm{D}}, y^1_{\mathrm{D}})$ et $(x^2_{\mathrm{D}}, y^2_{\mathrm{D}})$ les coordonnées des dislocations de vecteur de Burgers respectivement $+\vec{b}$ et $-\vec{b}$. Cette relation entre contrainte et position des dislocations sera utilisée pour définir la position des dislocations lors du calcul des potentiels de Peierls sous contrainte (annexe C).

Les conditions aux limites tri-périodiques sont très répandues pour la modélisation ab initio des dislocations car elles permettent d'avoir accès à des grandeurs énergétiques. Ces mêmes conditions au limites peuvent être également utilisées dans des simulations de dynamique moléculaire pour étudier la dynamique des dislocations à différentes températures. On impose alors soit une déformation sur la boîte de simulation, soit une contrainte grâce à l'algorithme de Parrinello-Rahman. Cependant, comme les deux dislocations composant le dipôle ont un vecteur de Burgers opposé, elles glissent en sens opposé. La position relative des dislocations évoluant au cours de la dynamique, leur interaction n'est pas constante. Ceci peut-être problématique, en particulier dans les boîtes de simulation de petite taille, puisque la force s'exerçant sur chacune des dislocations varie au cours de la simulation.

1.1.4 Dislocation en conditions aux limites semi-périodiques

Le problème de cette interaction entre dislocations variant au cours de la dynamique peut être résolu en se contentant d'imposer des conditions aux limites périodiques le long de la dislocation et dans la direction de glissement et en gardant des surfaces dans la direction perpendiculaire au plan de glissement (Fig. 1.4). Il est alors possible d'introduire dans la boîte de simulation une seule dislocation [14,15] et de la faire glisser indéfiniment, les conditions aux limites dans la direction de glissement étant transparente au passage de la dislocation. En outre, l'environnement vu par la dislocation n'est pas modifié quand celle-ci se déplace.

Les simulations peuvent se faire à déformation imposée en contrôlant le déplacement des atomes en surface (zones en gris sur la figure 1.4), ou bien à contrainte imposée en appliquant une force extérieure sur ces mêmes atomes.

2. $S_{klij} C_{ijmn} = \frac{1}{2}(\delta_{km}\delta_{ln} + \delta_{kn}\delta_{lm})$.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

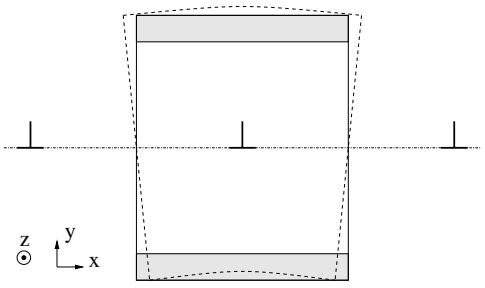


FIGURE 1.4 – Boîte de simulation avec conditions aux limites périodiques suivant x et z, et surfaces contrôlées suivant y. Le trait pointillé schématise la boîte de simulation après introduction de la dislocation (ici coin) et avant imposition des conditions aux limites périodiques suivant x. Les zones de surface en gris servent à imposer une déformation ou une contrainte.

Le fait d'utiliser des conditions aux limites périodiques dans la direction de glissement en n'ayant qu'une seule dislocation, et donc un circuit de Burgers non fermé, nécessite d'imposer une déformation inhomogène sur la boîte de simulation (*cf.* Fig. 1.4 pour une dislocation de type coin). L'interaction de ce champ de déformation avec la dislocation sera minimale si cette dernière se trouve à égale distance des deux surfaces [14].

Ce type de conditions aux limites est bien adapté à l'étude de la dynamique d'une ou de quelques dislocations avec un potentiel empirique. Pour les études statiques en calcul ab initio, on se heurte au même problème qu'avec les méthodes d'agrégat puisque la non localité de l'énergie calculée ab initio et la présence de surfaces empêche d'isoler la contribution énergétique de la dislocation.

1.2 Dislocation et théorie élastique

En parallèle de la simulation atomique des dislocations, il s'avère utile, voire indispensable, de construire des outils de modélisation en théorie élastique de ces mêmes dislocations. Ceci permet par exemple de construire les configurations initiales utilisées dans les simulations atomiques en imposant sur chaque atome le déplacement prédit par la théorie élastique. La comparaison du champ de déplacement obtenu après relaxation par simulation atomique avec le champ élastique peut permettre également d'identifier les ingrédients à rajouter à la théorie élastique des dislocations pour obtenir une description plus quantitative (*cf.* chap. 4 sur le champ de cœur de la dislocation vis). Cette même théorie élastique permet, dans le cas de conditions aux limites tri-périodiques (§1.1.3), de calculer l'énergie élastique emmagasinée dans la boîte de simulation pour la retrancher de l'énergie d'excès obtenue

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

par simulations atomiques.

Dans cette perspective, nous avons développé un code, Babel, adapté à la simulation des dislocations rectilignes infinies reposant sur la théorie élastique anisotrope des dislocations. La prise en compte de l'anisotropie élastique se fait grâce au formalisme de Stroh [16, 17]. La méthode de régularisation des sommes conditionnellement convergentes proposée par Cai *et al.* [18] a été implémentée afin de calculer les champs élastiques des dislocations dans le cas de conditions aux limites périodiques. Ce code permet donc d'obtenir le champ élastique de Volterra (déplacement et contrainte) d'une ou plusieurs dislocations, soit isolées, soit dans un réseau périodiques, et également de calculer l'énergie élastique correspondante. Les développements en théorie élastique des dislocations décrits dans ce manuscrit, contribution des tractions de cœur à l'énergie élastique (chap. 2) et modélisation du champ de cœur (chap. 4), ont été implémentés dans ce code.

Outre les travaux décrits dans ce manuscrit, ce code a permis

- l'étude des propriétés de cœur des dislocations vis dans les métaux de transition cubique centré [19, 20],
- l'étude de la diffusion d'un atome de carbone dans le champ de contrainte d'une dislocation dans le fer [21–23],
- la construction de joints de grains de faible désorientation dans SiC [24],
- la construction de dipôles de dislocations coins dans UO_2. [25]

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Chapitre 1

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Chapitre 2

Énergie élastique, tractions de cœur et énergie de cœur

Article associé:

Clouet E. *Elastic energy of a straight dislocation and contribution from core tractions*. Philos. Mag. **89** (2009), p. 1565.

Nos simulations atomiques nous permettent d'obtenir l'énergie d'excès d'une microstructure donnée de dislocations. Comme notre but est principalement de caractériser les propriétés d'une dislocation isolée, notamment son interaction avec le réseau périodique des atomes, il est nécessaire de retrancher de cette énergie d'excès l'énergie élastique qui contient l'interaction des différentes dislocations présentes dans la simulation, en particulier celles introduites par les conditions aux limites périodiques. Il nous faut donc pouvoir calculer l'énergie élastique et pour que ce calcul soit quantitatif, l'anisotropie élastique doit être prise en compte. Dans cette perspective, nous avons développé une expression analytique d'une des deux contributions à l'énergie élastique, la contribution des tractions de cœur, en prenant pleinement en compte l'anisotropie élastique [26] grâce au formalisme de Stroh [16, 17]. Cette contribution, bien que souvent ignorée, s'avère nécessaire pour définir l'énergie élastique de façon non ambiguë. Seule une expression de cette contribution dans l'approximation isotrope de la théorie élastique existait auparavant [27].

Dans ce chapitre, nous définissons les différentes contributions à l'énergie élastique d'une dislocation, dans le but ensuite de clairement partitionner l'énergie de la dislocation entre énergie élastique et énergie de cœur. Afin de ne pas alourdir inutilement le texte, nous utilisons la théorie élastique isotrope pour caractériser les différentes contributions à l'énergie élastique. Les développements en théorie élastique anisotrope ne sont pas repris ici, l'expression anisotrope de la contribution élastique des tractions de cœur

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

pouvant être retrouvée dans l'article paru en 2009 dans Phil. Mag. [26]. Une étude sur la dislocation coin dans le fer et une autre sur la dislocation vis dans le zirconium nous servent ensuite d'illustration. Ces études montrent que grâce à une définition correcte de l'énergie élastique, il est possible de définir une énergie de cœur de la dislocation ne dépendant pas des conditions de simulation. Cette énergie de cœur est donc une propriété intrinsèque de la dislocation.

2.1 Énergie élastique d'une dislocation

Pour définir l'énergie élastique d'une ou de plusieurs dislocations, on considère que le champ élastique créé par une ligne de dislocation se réduit à la solution de Volterra. Il s'agit du terme principal dans les développements en série des champs de déplacement et de contrainte, terme minimal obéissant aux lois d'équilibre mécanique et conduisant à une discontinuité de déplacement. Les champs élastiques à plus courtes distance, champs de cœur comme celui créé par une possible dilatation du cœur (*cf.* chap. 4), ne sont pas pris en compte ici. L'énergie élastique est alors donnée par l'intégrale de la densité d'énergie $\sigma_{ij}\varepsilon_{ij}$ sur tout le volume, à l'exception d'une région de cœur autour des lignes de dislocation. Cette région de cœur exclut la région où l'élasticité ne peut pas être appliquée car les déformations y sont trop importantes. Nous reprenons la convention classique [4, 28] qui considère un cylindre de rayon r_c pour isoler cette région de cœur. Grâce au théorème de Gauss, l'énergie élastique peut être décomposée en deux contributions :

- celle correspondant à l'intégrale le long de la discontinuité de déplacement du travail des forces nécessaires pour créer la dislocation. Cette contribution varie avec le logarithme d'une distance caractéristique de la microstructure de dislocations.
- la contribution des tractions de cœur, correspondant au travail des forces de traction sur le cylindre qui isole le cœur de la dislocation.

La contribution de la discontinuité de déplacement domine généralement l'énergie élastique. Par conséquent, il est très courant que elle seule soit considérée. Cependant, pour une définition correcte de l'énergie élastique, ces deux contributions doivent être prises en compte. Sans la contribution des tractions de cœur, l'énergie élastique n'est plus une variable d'état et ses variations ne correspondent plus au travail des forces de Peach-Koehler comme nous le verrons un peu plus loin.

2.1.1 Dipôle de dislocations

Pour illustrer plus clairement les deux contributions intervenant dans l'énergie élastique, nous considérons un dipôle de dislocations infinies rectilignes. La première dislocation, de vecteur de Burgers $\vec{b}$, se situe à l'origine

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

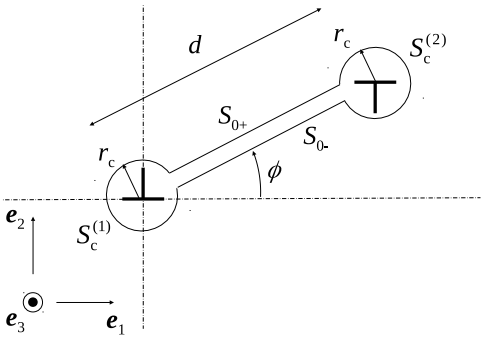


FIGURE 2.1 – Définition des surfaces d'intégration pour le calcul de l'énergie élastique d'un dipôle de dislocations.

et la seconde dislocation, de vecteur de Burgers $-\vec{b}$, au point repéré par ses coordonnées cylindrique (d, ϕ) (Fig. 2.1). À noter que les surfaces de discontinuité créées par chaque dislocation ne correspondent pas forcément à leur plan de glissement, mais sont orientées afin de s'annuler respectivement en dehors du dipôle. Ainsi, il n'y a pas de discontinuité de déplacement loin du dipôle et le système peut être isolé mécaniquement.

L'énergie élastique créée par le dipôle dans un milieu infini est

$$E_{\text{dipole}}^{\text{elas}} = \frac{1}{2} \iiint_V \left(\sigma_{ij}^{(1)} + \sigma_{ij}^{(2)}\right) \left(\varepsilon_{ij}^{(1)} + \varepsilon_{ij}^{(2)}\right) \mathrm{d}V,$$

où $\sigma^{(n)}$ et $\varepsilon^{(n)}$ sont la contrainte et la déformation créées par la dislocation n. Le volume d'intégration est le volume infini à l'exclusion des deux cylindres de rayon r_c isolant les cœurs de dislocation.

Le théorème de Gauss permet de réécrire cette intégrale de volume en intégrale de surface

$$E_{\text{dipole}}^{\text{elas}} = \frac{1}{2} \iint_S \left(\sigma_{ij}^{(1)} + \sigma_{ij}^{(2)}\right) \left(u_i^{(1)} + u_i^{(2)}\right) \mathrm{d}S_j,$$

avec $\vec{u}^{(n)}$ le déplacement de la dislocation n. La surface d'intégration se compose des deux surfaces cylindriques $S_c^{(1)}$ et $S_c^{(2)}$ isolant les cœurs, et les deux surfaces S_{0-} et S_{0+} permettant d'enlever la discontinuité de déplacement (Fig. 2.1). L'intégration sur les deux cylindres de cœur conduit à la même contribution

$$E_c^{\text{elas}}(\phi) = \frac{1}{2} \iint_{S_c^{(1)}} \sigma_{ij}^{(1)} u_i^{(1)} \mathrm{d}S_j = \frac{1}{2} \iint_{S_c^{(2)}} \sigma_{ij}^{(2)} u_i^{(2)} \mathrm{d}S_j. \tag{2.1}$$

L'énergie élastique du dipôle est alors

$$E_{\text{dipole}}^{\text{elas}} = 2E_c^{\text{elas}}(\phi) + b_i K_{ij}^0 b_j \ln\left(\frac{d}{r_c}\right), \tag{2.2}$$

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

où le facteur prélogarithmique fait intervenir le tenseur de Stroh K^0, tenseur s'exprimant à partir des constantes élastiques [16, 17].

Pour un milieu isotrope, le tenseur de Stroh s'exprime à partir du module de cisaillement μ et du coefficient de Poisson ν

$$K^0 = \frac{\mu}{2\pi\,(1-\nu)} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & (1-\nu) \end{pmatrix},$$

où le cristal a été orienté de façon à faire correspondre la direction $\vec{e}_3$ avec la ligne de dislocation (Fig. 2.1). La contribution des tractions de cœur est donnée par Bullough et Foreman [27]. En supposant que l'axe $\vec{e}_1$ est colinéaire avec la composante coin du vecteur de Burgers ($b_2 = 0$ donc), on obtient

$$E_{\mathrm{c}}^{\mathrm{elas}}(\phi) = \frac{\mu {b_1}^2}{16\pi\,(1-\nu)} \left[\frac{1}{1-\nu} - 2\cos(2\phi) \right].$$

À noter que la contribution à l'énergie élastique des tractions de cœur ne dépend pas du rayon de cœur r_{c}. Cette contribution est nulle pour une dislocation vis ($b_1 = 0$) en théorie élastique isotrope. Si la discontinuité de déplacement correspond au plan de glissement des dislocations ($\phi = 0$ ou $\phi = \pi$), on retrouve l'expression donnée par Hirth et Lothe (Eq. (3-53) in Ref. [4]).

2.1.2 Dislocation isolée

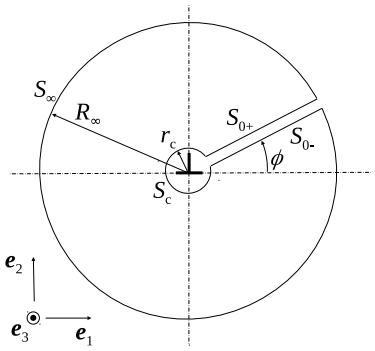


FIGURE 2.2 – Définition des surfaces d'intégration pour le calcul de l'énergie élastique d'une dislocation isolée.

Si on souhaite définir l'énergie d'une dislocation infinie rectiligne isolée, il est d'usage d'introduire un second cylindre de rayon R_∞ centré sur la dislocation et d'intégrer la densité d'énergie élastique sur le volume compris

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

entre les deux cylindres de rayon r_c et R_∞ (Fig. 2.2). En effet, comme une dislocation infinie rectiligne ne peut pas exister seule (il faut forcément un autre défaut pour clore la discontinuité introduite par cette dislocation), son énergie élastique intégrée sur un volume infinie diverge. Il faut donc adopter une convention pour définir son énergie élastique et introduire une coupure loin de la dislocation. Le théorème de Gauss conduit alors à l'énergie élastique

$$E_{\text{dislo}}^{\text{elas}} = \frac{1}{2} \iint_S \sigma_{ij} u_i \mathrm{d}S_j,$$

où la surface d'intégration S se compose des deux surfaces S_{0-} et S_{0+} bornant la discontinuité, la surface cylindrique S_c isolant le cœur, et la surface cylindrique S_∞ à l'extérieur. Les intégrales sur ces deux dernières surfaces, S_c et S_∞, s'annulent en fait car les normales à ces surfaces sont orientées en sens opposé [16, 17]. Il ne reste donc que la contribution de la discontinuité, conduisant au résultat connu

$$E_{\text{dislo}}^{\text{elas}} = \frac{1}{2} b_i K_{ij}^0 b_j \ln\left(\frac{R_\infty}{r_c}\right). \tag{2.3}$$

Il n'y a donc pas de contribution des tractions de cœur dans ce cas. Cependant, il apparaît clairement qu'il s'agit d'un artefact lié à la nécessité d'introduire une surface extérieure S_∞ pour définir l'énergie élastique et l'empêcher de diverger. La contribution à l'énergie élastique des tractions de cœur se manifeste alors par un flux d'énergie du cœur vers la surface extérieure. Le fait de vouloir définir l'énergie élastique d'une dislocation isolée, alors que par définition un tel défaut ne peut pas exister seul, présente donc des limitations.

2.1.3 Énergie élastique : variable d'état

Les premiers à avoir mis en évidence l'importance de la contribution des tractions de cœur pour définir l'énergie élastique de dislocations sont Bullough et Foreman [27]. Ils montrent qu'avec cette contribution l'énergie élastique d'une boucle prismatique ne dépend pas du mécanisme envisagé pour créer la boucle. Ils calculent cette énergie élastique en imaginant que la boucle a été créée soit par glissement depuis l'infini sur son cylindre prismatique, soit par montée en la faisant croitre depuis son centre. La même énergie élastique est obtenue au final quand toutes les contributions sont bien prises en compte, montrant ainsi que l'énergie élastique est une variable d'état.

L'importance des tractions de cœur apparaît également dans l'expérience de pensée imaginée par Hirth et Lothe (Ref. [29] et § 8-3 in Ref. [4]). Considérons un dipôle de dislocations coins auquel on fait subir le cycle décris sur la figure 2.3 et analysons la variation d'énergie le long de ce cycle avec

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

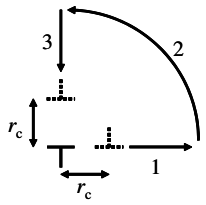


FIGURE 2.3 – Dipôle de dislocations coins subissant un cycle thermodynamique réversible tel qu'imaginé par Hirth et Lothe (Ref. [29] et § 8-3 in Ref. [4]).

la théorie élastique isotrope. Le dipôle est tout d'abord créé avec les deux dislocations sur le même plan de glissement. L'énergie à apporter au système pour cette étape est $2E^{\text{core}} + 2E_{\text{c}}^{\text{elas}}(\phi = 0)$ avec E^{core} l'énergie de cœur, c'est-à-dire la partie de l'énergie d'excès de la dislocation qui ne provient pas de son champs élastique. Une des deux dislocations est ensuite déplacée suivant le cycle $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3$. Le travail des forces de Peach-Koehler au cours de ce déplacement est $\mu b^2 (1-\nu)/2\pi$. Quand les dislocations sont à une distance r_{c}, le dipôle est détruit et on récupère l'énergie $2E^{\text{core}} + 2E_{\text{c}}^{\text{elas}}(\phi = \pi/2)$. La variation de l'énergie le long de ce cycle est donc $2E_{\text{c}}^{\text{elas}}(\phi = \pi/2) - 2E_{\text{c}}^{\text{elas}}(\phi = 0) + \mu b^2 (1-\nu)/2\pi = 0$. L'état initial et final de ce cycle étant identique, *i.e.* le cristal parfait, la variation d'énergie au cours du cycle doit être nulle selon les principes de la thermodynamique. La dernière relation montre que c'est la prise en compte de la contribution des tractions de cœur qui permet à la variation d'énergie élastique d'être nulle. Sans cette contribution, l'énergie élastique ne serait pas une variable d'état en accord avec le travail des forces de Peach-Koehler. Notons qu'il n'est pas nécessaire, pour définir sans ambiguïté l'énergie élastique, d'adopter une description plus précise du cœur de la dislocation, comme le modèle de Peierls-Nabarro ou le modèle de cœur standard de Lothe [30].

2.1.4 Théorie élastique anisotrope

Comme indiqué en introduction, il n'existait pas avant notre travail [26] d'expression de la contribution à l'énergie élastique des tractions de cœur prenant en compte l'anisotropie élastique. La variation de cette contribution avec une rotation du plan de discontinuité était connue [18, 31] : cette variation correspond en fait à la dépendance angulaire de l'énergie d'interaction entre deux dislocations dérivée par Stroh [16] et peut être retrouvée en considérant le travail des forces de Peach-Koehler sur un dipôle [18]. Mais aucune expression analytique de la valeur absolue de cette contribution n'était disponible. Les rares articles [32–35] qui considéraient cette contribution ainsi que l'anisotropie élastique dans leurs calculs d'énergie élastique avaient recours

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

à une intégration numérique sur la surface du cylindre de cœur (Éq. 2.1).

L'expression analytique que nous avons obtenue pour cette contribution à l'énergie élastique des tractions de cœur est donnée par l'équation (16) de la référence [26]. Cette expression repose sur le formalisme des équations sextiques développé par Stroh [16, 17]. Nous montrons également dans cet article que la variation de cette contribution avec l'angle définissant le plan de discontinuité est en accord avec la dépendance angulaire de l'énergie d'interaction entre deux dislocations dérivées par Stroh [16] ainsi que par Cai *et al.* [18], et donc avec le travail des forces de Peach-Koehler.

Tout comme en élasticité isotrope, l'expression générale de $E_{\mathrm{c}}^{\mathrm{elas}}(\phi)$ est indépendante du rayon de cœur r_{c} : cette contribution dépend uniquement de l'angle ϕ définissant l'orientation du plan de discontinuité. Outre les propriétés de symétrie du cristal, cette contribution possède la symétrie $E_{\mathrm{c}}^{\mathrm{elas}}(\phi) = E_{\mathrm{c}}^{\mathrm{elas}}(\phi + \pi)$. Cette contribution ne dépend donc pas du sens de la discontinuité par rapport à la dislocation. Enfin, la prise en compte de l'anisotropie élastique fait que cette dislocation n'est pas forcément nulle pour une dislocation vis.

2.2 Énergie de cœur

L'énergie élastique d'une dislocation étant décrite, il est possible à présent de définir son énergie de cœur. L'énergie de cœur est la partie de l'énergie d'excès de la dislocation provenant des interactions atomiques proches du cœur de la dislocation qui ne peuvent pas être décrites par l'élasticité, les déformations mises en jeu étant trop importantes. Il s'agit donc d'une contribution supplémentaire venant s'ajouter à l'énergie élastique. Cette contribution correspondant à une densité d'énergie locale, l'énergie de cœur doit être une propriété intrinsèque de la dislocation, c'est-à-dire que sa valeur doit dépendre seulement de la dislocation considérée et non de son environnement, en particulier les autres dislocations présentes. Il faut noter cependant que l'énergie de cœur doit être définie pour un rayon de cœur r_{c} donné. Ce rayon partitionne l'énergie entre contribution de cœur et contribution élastique.

Li *et al.* [31] ont introduit l'idée que l'énergie de cœur devait dépendre également du choix d'une direction de référence. Cette direction définit le dipôle de dislocations utilisé pour extraire l'énergie de cœur de simulations atomiques, donc la discontinuité de déplacement créée par la dislocation. Le besoin d'associer une direction de référence à l'énergie de cœur provient de l'omission la contribution des tractions de cœur $E_{\mathrm{c}}^{\mathrm{elas}}(\phi)$ dans l'énergie élastique. Au final, ce n'est pas l'énergie de cœur E^{core}, mais la somme $E^{\mathrm{core}} + E_{\mathrm{c}}^{\mathrm{elas}}(\phi)$ qui est calculée, l'angle ϕ définissant la direction de référence introduite par Li *et al.* [31]. Bien que ces deux quantités, E^{core} et $E_{\mathrm{c}}^{\mathrm{elas}}(\phi)$, soient associées à l'introduction d'un cylindre de cœur, elles sont de nature complètement différente. L'énergie de cœur correspond réellement

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

à une énergie d'excès stockée au niveau du cœur de la dislocation, ce qui n'est pas le cas de $E_{\mathrm{c}}^{\mathrm{elas}}(\phi)$, contribution à l'énergie élastique dont la définition est associée mathématiquement au cylindre de cœur via le théorème de Gauss, sans que cela ne corresponde à une réalité physique. Il est donc plus logique de définir séparément ces deux quantités afin de garder son caractère local à l'énergie de cœur.

Nous montrons dans la suite avec deux exemples que la bonne prise en compte de la contribution des tractions de cœur à l'énergie élastique conduit à une énergie de cœur de la dislocation qui ne dépend pas des conditions de simulation.

2.2.1 La dislocation coin dans le fer

Au cours du stage de master 1 de Benjamin Lemoine, nous avons étudié par simulations atomiques les dislocations coin de vecteur de Burgers $1/2\langle 111\rangle$ dans le fer cubique centré en utilisant le potentiel EAM développé par Mendelev *et al.* [36]. L'énergie de cœur de la dislocation a été obtenue par deux méthodes différentes, l'approche agrégat à bords fixes et l'approche dipôle en conditions aux limites périodiques. Ce travail nous a permis de montrer que ces deux approches conduisent bien à la même valeur pour l'énergie de cœur dès lors que la contribution à l'énergie élastique des tractions de cœur est correctement prise en compte. Nous présentons ici les résultats pour la dislocation coin de vecteur ligne $\langle 112\rangle$, glissant donc dans un plan $\{110\}$, le même travail ayant également été réalisé pour la dislocation coin glissant dans les plans $\{112\}$ [26].

Approche agrégat

Dans l'approche agrégat, une fois les positions atomiques relaxées, nous calculons l'énergie d'excès $E(R_\infty)$ créée par la dislocation dans un cylindre de rayon R_∞ centré sur la dislocation. Cette énergie d'excès est la différence d'énergie entre le système avec une dislocation et le cristal parfait pour le même nombre d'atomes. Pour une simulation donnée, nous calculons $E(R_\infty)$ pour différents rayons R_∞ pris inférieurs au rayon maximal définissant l'agrégat cylindrique moins le rayon de coupure r_{cut} du potentiel afin de s'assurer que les atomes ne sont pas perturbés par la surface (Fig. 2.4).

Suivant la théorie élastique (Éq. 2.3), cette énergie d'excès varie avec le rayon R_∞ selon

$$E(R_\infty) = E^{\mathrm{core}} + \frac{1}{2} b_i K_{ij}^0 b_j \ln\left(\frac{R_\infty}{r_{\mathrm{c}}}\right). \tag{2.4}$$

Dans cette expression, seule E^{core} est inconnue, le préfacteur $b_i K_{ij}^0 b_j$ étant quant à lui calculé grâce au formalisme de Stroh [16, 17] afin de prendre

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

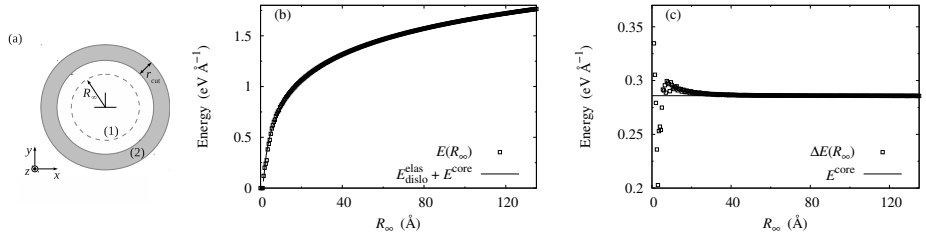


FIGURE 2.4 – Calcul de l'énergie d'une dislocation coin $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ dans le fer avec l'approche agrégat ($r_c = b \sim 2.473\,\text{Å}$). Dans les simulations atomiques, l'énergie d'excès $E(R_\infty)$ de la dislocation est obtenue par intégration sur un cylindre de rayon R_∞ (*cf.* schéma (a)). Les résultats des simulations atomiques (symboles) sont comparées à la valeur prédite par la théorie élastique (ligne continue) en (b) avec l'énergie de cœur ajustée. La contribution élastique $E^{elas}_{dislo} = 1/2 b_i K^0_{ij} b_j \ln(R_\infty/r_c)$ a été retranchée en (c) pour montrer la convergence vers la constante E^{core}.

pleinement en compte l'anisotropie élastique. L'énergie de cœur E^{core} est donc obtenue par ajustement de cette expression sur les énergies d'excès extraites des simulations atomiques pour différents rayons R_∞. On obtient pour la dislocation coin $1/2\langle 111\rangle\,\{110\}$ $E^{core} = 286\,\text{meV Å}^{-1}$ pour $r_c = b$. On remarque au passage le très bon accord entre théorie élastique et simulations atomiques pour décrire l'énergie de la dislocation (Fig. 2.4).

Approche dipôle

Nous considérons ensuite des simulations atomiques d'un dipôle de dislocations coins avec des conditions aux limites périodiques. Les deux dislocations composant le dipôle partagent le même plan de glissement, *i.e.* $\phi = 0$ (Fig. 2.5). Après relaxation de toutes les positions atomiques, l'énergie d'excès de la boîte de simulation doit pouvoir s'écrire

$$E = 2E^{core} + 2E^{elas}_c(\phi = 0) + b_i K^0_{ij} b_j \ln\left(\frac{d}{r_c}\right) + E^{elas}_{inter}, \qquad (2.5)$$

avec $d = l_x/2$, la distance entre les deux dislocations composant le dipôle. E^{elas}_{inter} est l'énergie élastique d'interaction entre le dipôle de la cellule élémentaire et ses images périodiques. Cette énergie d'interaction est calculée grâce à la méthode de Cai *et al.* [18]. L'équation 2.5 permet donc de déduire des simulations atomiques l'énergie de cœur : l'énergie d'excès E est directement donnée par les simulations atomiques tandis que les différentes contributions élastiques sont calculées grâce à notre code Babel de modélisation élastique des dislocations.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

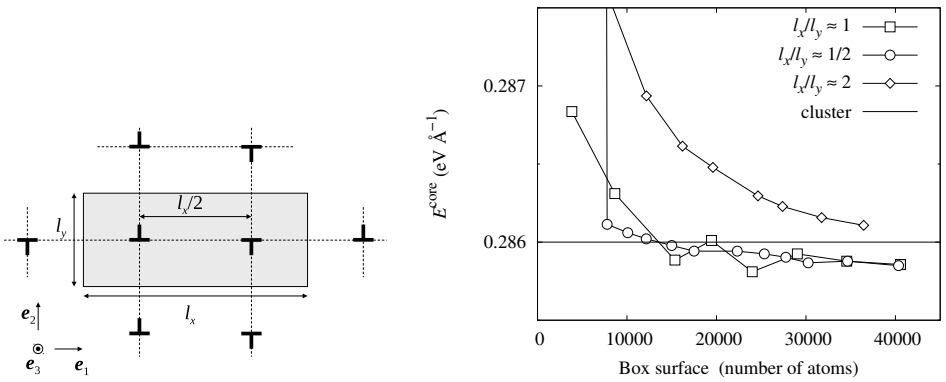


FIGURE 2.5 – Énergie de cœur d'une dislocation coin $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ dans le fer obtenue dans l'approche dipôle pour différentes tailles et différents facteurs de forme de la cellule périodique. La valeur obtenue dans l'approche agrégat (Fig. 2.4) est dénotée *cluster* et est représentée par la ligne horizontale. Le schéma à gauche définit la cellule périodique utilisée.

Les énergies de cœur ainsi obtenues sont présentées sur la figure 2.5 pour différentes tailles et différents facteurs de forme de la boîte de simulation. Toutes les géométries convergent avec la taille de la simulation vers la même limite correspondant à l'énergie de cœur obtenues dans l'approche agrégat. Cet accord entre les deux méthodes pour définir l'énergie de cœur n'est possible que grâce à la bonne prise en compte de la contribution à l'énergie élastique des tractions de cœur, $E_c^{\text{elas}}(\phi = 0) = -87\,\text{meV Å}^{-1}$.

2.2.2 La dislocation vis dans le zirconium

Notre étude sur la dislocation vis $1/3\langle 1\bar{2}10\rangle\{10\bar{1}0\}$ dans le zirconium [37] donne un autre exemple illustrant l'importance de correctement définir l'énergie élastique pour pouvoir extraire de simulations atomiques l'énergie de cœur. Dans cette étude, nous avons utilisé l'approche dipôle pour extraire l'énergie de cœur d'une dislocation vis de vecteur de Burgers $1/3\langle 1\bar{2}10\rangle$ dissociée dans un plan prismatique $\{10\bar{1}0\}$. Deux arrangements périodiques différents ont été utilisés, l'arrangement O pour lequel la discontinuité de déplacement est fixé par $\phi = 0$ et l'arrangement S pour lequel $\phi \sim 45°$ (Fig. 2.6). Les résultats obtenus avec le potentiel EAM n°3 de Mendelev et Ackland [38] montrent que ces deux arrangements périodiques convergent bien aux grandes tailles vers la même énergie de cœur (Fig. 2.6), $E^{\text{core}} = 163\,\text{meV Å}^{-1}$. Sans la contribution des tractions de cœur à l'énergie élastique, une différence de $\sim 10\,\text{meV Å}^{-1}$ aurait été obtenue entre ces deux arrangements.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

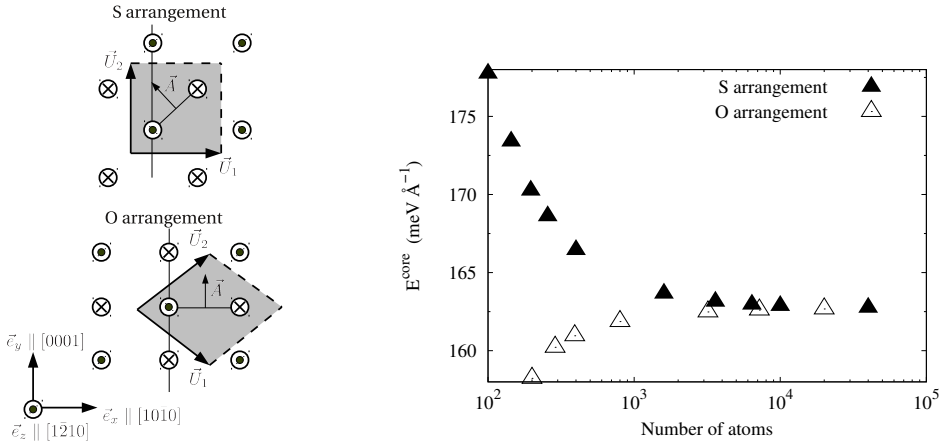


FIGURE 2.6 – Énergie de cœur d'une dislocation vis $1/3\langle 1\bar{2}10\rangle\{10\bar{1}0\}$ dans le zirconium pour différentes tailles de boîte obtenue avec deux arrangements périodiques différents.

2.3 Conclusion

Ce chapitre nous a permis de montrer qu'il était possible d'extraire des simulations atomiques l'énergie de cœur d'une dislocation, propriété intrinsèque de la dislocation ne dépendant pas des conditions de simulation. Ceci est réalisable grâce à la prise en compte de toutes les contributions composant l'énergie élastique, en particulier la contribution des tractions de cœur pour laquelle nous avons développé une expression analytique prenant en compte l'anisotropie élastique [26]. Nous allons pouvoir nous intéresser à présent aux variations de cette énergie de cœur, que ce soient les variations avec le caractère de la dislocation, ou bien les variations avec la position de la dislocation lorsque celle-ci ne se trouve plus forcément dans sa position d'équilibre au fond de sa vallée de Peierls.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Chapitre 3

Propriétés de cœur des dislocations mixtes dans le fer

La plasticité des métaux cubiques centrés (c.c.) à basse température est principalement contrôlée par les dislocations vis à cause de leur contrainte de Peierls élevée qui fait que ces dislocations sont difficiles à mettre en mouvement [39–41]. Ces dislocations, de vecteur de Burgers $1/2\langle 111\rangle$ glissent dans les plans de type $\{110\}$. Cependant, des dislocations mixtes ou coins, dislocations dont la direction n'est pas colinéaire à leur vecteur de Burgers, existent nécessairement : une boucle de dislocation, étant un défaut linéaire fermé le long duquel le vecteur de Burgers est conservé, présente à la fois des parties vis et non vis, même si les parties vis sont les plus importantes. Les dislocations mixtes sont donc nécessaires à la propagation de la déformation plastique dans le cristal de fer.

Nous avons étudié les propriétés de cœur des dislocations mixtes de vecteur de Burgers $1/2\langle 111\rangle$ glissant dans les plans $\{110\}$ dans le fer cubique centré par l'intermédiaire de simulations atomiques. Ces propriétés de cœur, comme l'énergie de cœur de la dislocation ou la barrière et contrainte de Peierls, déterminent la mobilité de ces dislocations et également, en partie, la forme des boucles de dislocation sous contrainte telles qu'elles peuvent être observées en microscopie électronique à transmission [42]. Le but de cette étude est de voir comment ces propriétés varient en fonction du caractère de la dislocation, c'est-à-dire l'angle θ défini par le vecteur de Burgers et le vecteur ligne. Ceci devrait nous permettre de confirmer que les dislocations vis sont bien les plus difficiles à faire glisser et également de voir si les orientations non vis peuvent avoir une influence sur la déformation plastique dans le fer.

Dans ce chapitre, nous présentons principalement les résultats obtenus avec le potentiel empirique de Mendelev *et al.* [36] au cours du stage de césure ($2^{\text{ème}}$ année d'école d'ingénieur) de Mathilde Miguras. Comme cette étude a révélé que l'orientation mixte pour laquelle $\theta \sim 70.5°$ possède des propriétés

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

particulières, nous avons également étudié plus en détails cette dislocation mixte en effectuant pour celle-ci des calculs ab initio au cours du stage de fin d'études de Mathieu Albagnac. Ce travail, pas encore complètement achevé à l'heure actuel, sera brièvement abordé.

3.1 Système de glissement $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ dans les métaux cubiques centrés

3.1.1 Brève étude bibliographique

À basse température, les dislocations transportant la déformation plastique dans les métaux cubiques centrés ont un vecteur de Burgers $1/2\langle 111\rangle$ et glissent dans les plans $\{110\}$. Jusqu'à présent, la plupart des études à l'échelle atomique des dislocations dans les métaux cubiques centrés se sont concentrées sur les dislocations vis et peu d'études ont regardé d'autres orientations de la dislocation. Ceci se justifie par le fait qu'expérimentalement, on observe à basse température des microstructures de dislocation mettant en évidence l'importance des dislocations vis : les boucles glissiles dans les plans $\{110\}$ présentent des parties vis rectilignes très allongées tandis que les parties mixtes ou coins sont courbes [42]. Ceci s'explique par le fait que les dislocations vis sont difficiles à mettre en mouvement. Elles contrôlent donc le développement de la déformation plastique tandis que les autres orientations s'équilibrent instantanément par rapport au mouvement des vis. En effet, les formes des boucles de dislocation observées en microscopie électronique à transmission sont en très bon accord dans leur partie non vis avec les formes d'équilibre prédites par un modèle de tension de ligne [42].

Expérimentalement, Seeger *et al.* [43, 44] ont émis l'hypothèse qu'un des pics de relaxation observés à basse température dans des expériences de frottement interne sur des métaux cubiques centrés, le niobium et le vanadium, était relié à la germination de doubles décrochements sur des dislocations mixtes (pic de relaxation de type Bordoni). Ils proposent que les dislocations mixtes de vecteur ligne $\langle 111\rangle$, dislocations résidant dans une direction dense du cristal mais dont le vecteur ligne n'est pas colinéaire avec le vecteur de Burgers, seraient à l'origine de ce pic. La contrainte de Peierls serait donc plus élevée pour cette orientation que pour les autres caractères, tout en restant plus basse que pour la vis, si bien qu'à très basse température le glissement de cette dislocation mixte $\langle 111\rangle$ serait thermiquement activé et procéderait par la germination et la propagation de doubles décrochements, tout comme pour la vis.

Wüthrich [45, 46] a étudié par simulations atomiques cette dislocation mixte $\langle 111\rangle$ dans le fer, en particulier sa structure de cœur ainsi que la structure et l'énergie de formation des décrochements. En se basant sur le potentiel empirique de Chang et Graham [47], il montre que la structure de

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

cœur de cette dislocation mixte est non dégénérée et s'étale dans le plan de glissement {110}. Deux types de décrochements, formant à eux deux un double décrochement, existent. Ils s'étalent sur une distance de 3 à 4 b, b étant la norme du vecteur de Burgers, et leur énergie de formation est inférieure à 0.1 eV pour l'un et de l'ordre de 0.5 eV pour l'autre.

Vitek et Yamaguchi [48, 49] ont étudié six orientations différentes non vis de dislocations de vecteurs de Burgers $1/2\langle 111\rangle$ glissant dans un plan {110} pour un métal c.c. représenté par trois potentiels interatomiques différents. Toutes ces dislocations, quelque soit le potentiel, sont planaires et parfaitement étalées dans le plan de glissement, l'extension de cet étalement dépendant bien entendu du caractère de la dislocation et du potentiel interatomique. Sous contrainte, l'étalement des cœurs augmente. Pour toutes les orientations considérées, la contrainte de Peierls est environ 10 à 15 fois inférieure à la contrainte de Peierls de la dislocation vis, quelque soit le potentiel considéré. La dislocation mixte $\langle 111\rangle$ a une contrainte de Peierls sensiblement plus élevée que les autres orientations mixtes ou la coin, mais l'écart n'excède pas un facteur 2.

Le même type d'étude a été réalisé par Cai *et al.* [40, 50] dans le molybdène en utilisant un potentiel de type Finnis-Sinclair. Ils observent également un étalement planaire des dislocations mixtes et coins, sans pouvoir toutefois mettre en évidence une dissociation comme avaient pu l'observer Vitek et Yamaguchi. Ils obtiennent une contrainte de Peierls de 2.4 GPa pour la vis, 320 MPa pour la mixte $\langle 111\rangle$, et enfin de l'ordre de 20 à 30 MPa pour les autres orientations mixtes et la coin. Plus récemment, Kang *et al.* [51] ont refait cette étude dans le tantale en calculant la contrainte de Peierls pour un grand nombre d'orientations d'une dislocation $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ toujours avec un potentiel Finnis-Sinclair. Les conclusions sont les mêmes : une contrainte de Peierls élevée pour la vis (2.8 GPa), la dislocation mixte $\langle 111\rangle$ ayant la contrainte de Peierls immédiatement inférieure (550 MPa). Ces résultats sont donc entièrement compatibles avec l'interprétation de Seeger *et al.* [43, 44] de ses expériences de frottement interne.

Quelques études par simulations atomiques [26, 52–58] se sont intéressées exclusivement aux propriétés des dislocations coins glissant dans les plans {110}. Ces études s'accordent pour dire que la contrainte de Peierls de la dislocation coin est basse. Même si à très basse température le glissement peut s'effectuer par germination et propagation de double décrochement, le régime athermal est très vite atteint.

Notons enfin que des simulations de dynamique moléculaire de l'interaction dans le fer d'une dislocation coin avec une cavité [59], une bulle d'hélium [60, 61] ou bien un précipité de chrome [62] tendent également à indiquer l'existence d'une forte contrainte de Peierls pour l'orientation mixte $\langle 111\rangle$. En effet, les dislocations coins ancrées sur ces défauts se courbent sous l'effet de la contrainte appliquée, mais la courbure n'est pas régulière et la dislocation présente des parties rectilignes dans l'orientation $\langle 111\rangle$ à

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

$\sim 70°$ du vecteur de Burgers. Ces segments rectilignes sont la signature d'une forte contrainte de Peierls pour l'orientation mixte $\langle 111 \rangle$ qui empêcherait la dislocation d'adopter sa forme d'équilibre pilotée par la tension de ligne. L'existence ou non de ces segments rectilignes dépend du potentiel interatomique utilisé : ils sont présents avec les deux versions du potentiel de Mendelev [36, 63], mais n'existent pas avec le potentiel d'Ackland 1997 [64] ni avec le potentiel de Dudarev et Derlet [65]. Il semble donc que, dans le fer, seuls les potentiels [36, 63] conduisant à la bonne structure de cœur pour la dislocation vis prédisent une forte contrainte de Peierls pour la dislocation mixte $\langle 111 \rangle$. Comme ces segments mixtes rectilignes alignés dans les directions $\langle 111 \rangle$ ne sont visibles dans les simulations de dynamique moléculaire qu'à très basse température ($T < 100\,\mathrm{K}$), il semble en outre que la forte contrainte de Peierls de la dislocation mixte $\langle 111 \rangle$ chute rapidement avec la température. Ceci pourrait expliquer pourquoi cette orientation particulière n'a pas été observée expérimentalement dans des essais de traction in situ.

3.1.2 Cristallographie

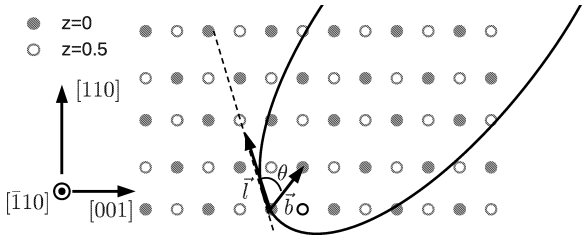


FIGURE 3.1 – Projection de la maille cubique centrée suivant la normale $[\bar{1}10]$ au plan de glissement des dislocations. Les atomes appartenant aux différents plans $(\bar{1}10)$ sont représentés par des cercles pleins ou vides. La ligne courbe symbolise la ligne de dislocation de vecteur de Burgers $\vec{b} = 1/2[111]$. Son vecteur ligne $\vec{l}$ est défini localement par la tangente à la ligne de dislocation et son caractère θ est donné par l'angle entre $\vec{b}$ et $\vec{l}$.

Pour étudier les dislocations du système de glissement $1/2\langle 111 \rangle \{110\}$, nous choisissons par convention le vecteur de Burgers $1/2[111]$ et le plan de glissement $(\bar{1}10)$. Le vecteur ligne $\vec{l}$ de la dislocation peut donc être tout vecteur appartenant à ce plan $(\bar{1}10)$, $\vec{l} = [111]$ par exemple pour la dislocation vis ou $\vec{l} = [11\bar{2}]$ pour la coin. La figure 3.1 représente le cristal cubique centré projeté dans la direction normale à ce plan de glissement. Le cristal est alors constitué d'un empilement périodique de deux plans $(\bar{1}10)$ séparés d'une distance $\sqrt{2}$. Notons sur cette figure l'existence de deux directions denses de type $\langle 111 \rangle$ appartenant au même plan de glissement, les directions $[111]$ et $[11\bar{1}]$ dans le cas du plan $(\bar{1}10)$ considéré ici.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Le caractère de la dislocation est défini par l'angle θ formé par le vecteur de Burgers et le vecteur ligne de la dislocation (Fig. 3.1), en prenant comme origine le vecteur de Burgers. Une dislocation vis a donc un caractère nul et une dislocation coin un caractère de $\pi/2$. Par convention, nous définissons le signe de θ par rapport à la direction $[\bar{1}10]$. Les propriétés des dislocations présentant une périodicité de π, le caractère de la dislocation sera défini dans l'intervalle restreint $[0 : \pi]$.

3.2 Énergie de cœur

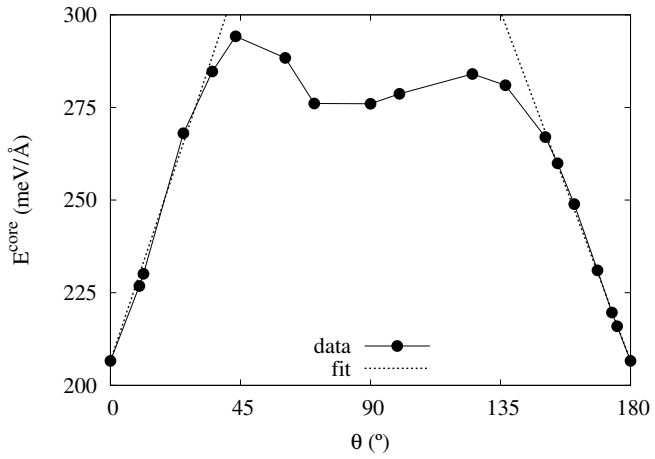


FIGURE 3.2 – Énergie de cœur en fonction du caractère de la dislocation ($r_c = b$). Les symboles correspondent aux résultats des simulations atomiques et les lignes pointillées à l'ajustement du modèle de décrochement (Éq. 3.1).

Les énergies de cœur des dislocations $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ ont été calculées pour différents caractères dans le fer en utilisant le potentiel EAM de Mendelev *et al.* [36]. Les variations de ces énergies de cœur sont représentées sur la figure 3.2 pour un rayon de cœur $r_c = b$ par convention. L'annexe A décrit comment ces énergies de cœur peuvent être transférées dans des simulations de dynamique des dislocations.

La dislocation vis est l'orientation pour laquelle l'énergie de cœur est minimale. On remarque une dépendance linéaire de l'énergie de cœur avec le caractère pour $|\theta| \leq 35°$, tandis que cette énergie de cœur est presque constante entre 35 et 145°.

La dépendance linéaire de l'énergie de cœur en fonction du caractère concerne les dislocations mixtes à forte composante vis. Elle s'explique par le fait que ces dislocations s'alignent avec la dislocation vis pour minimiser

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

leur énergie, mais forment des décrochements afin de conserver leur caractère. L'énergie de cœur de ces dislocations mixtes est donc composée d'une contribution correspondant à l'énergie de cœur des dislocations vis et d'une contribution E^{kink} nécessaire pour former un décrochement. Si l est la distance séparant deux décrochements, la longueur de la dislocation mixte correspondante est $l/\cos(\theta)$. L'énergie de cœur de la dislocation mixte doit donc vérifier la relation

$$\frac{l}{\cos(\theta)} E^{\text{core}}(\theta) = l E^{\text{core}}(0) + E^{\text{kink}}.$$

Le caractère θ est relié à la distance λ_{P} entre deux vallées de Peierls via la relation $\lambda_{\text{P}} = l \tan(\theta)$, ce qui permet d'écrire

$$E^{\text{core}}(\theta) = \cos(\theta) E^{\text{core}}(0) + \sin(\theta) \frac{E^{\text{kink}}}{\lambda_{\text{P}}}.$$

Finalement, un développement au premier ordre en θ conduit à la relation linéaire

$$E^{\text{core}}(\theta) = E^{\text{core}}(0) + \theta \frac{E^{\text{kink}}}{\lambda_{\text{P}}}. \tag{3.1}$$

Cette formule peut être utilisée pour ajuster les énergies de cœur des dislocations mixtes dans le domaine de variation linéaire. On obtient deux valeurs d'énergie de décrochement : une valeur pour les décrochements lacunaires [1] ($\theta > 0°$) valant 311 meV ; une pour les interstitiels ($\theta < 180°$) valant 280 meV. Ces résultats, obtenus en approche agrégat (*cf.* §2.2), sont du même ordre de grandeur (Tab. 3.1) que ceux obtenus en conditions aux limites tri-périodiques par Ventelon *et al.* [66], une fois la correction élastique appliquée pour prendre en compte les interactions élastiques entre dislocations décrochées dans ce dernier cas (annexe B.2). Des valeurs similaires ont également été obtenues par Rao [67] avec le même potentiel empirique (Tab. 3.1). Il peut être surprenant de voir que différents auteurs n'obtiennent pas exactement la même valeur. Cependant, comme noté par Hirth et Lothe (chap. 8.5 dans [4] et chap. 6.3 dans [30]), l'énergie de formation d'un simple décrochement n'est pas une grandeur bien définie. Le problème est similaire à la définition de l'énergie de cœur d'une dislocation isolée. En effet, il n'est pas possible de créer un décrochement sur une dislocation sans introduire un second défaut pour fermer la discontinuité de déplacement ainsi introduite, à moins de considérer une dislocation débouchant sur une surface. La contribution énergétique provenant des conditions aux limites (interaction du décrochement avec le second défaut ou contribution des forces images) est du même ordre de grandeur que l'énergie de formation du décrochement. Ceci explique donc la variabilité des valeurs données pour l'énergie de formation d'un décrochement. Bien entendu, le problème ne se pose que pour

1. Les décrochements lacunaires et interstitiels sont respectivement dénommés droites et gauches dans la référence [66]

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

un simple décrochement, l'énergie de formation d'un double décrochement étant parfaitement bien définie.

	Décrochement V	Décrochement I
ce travail	311	280
Ventelon *et al.* [66] [a]	350	250
Rao [67]	350	300

a. Après correction élastique afin de prendre en compte les conditions aux limites tri-périodiques (annexe B.2)

TABLE 3.1 – Énergies de formation des décrochements interstitiels (I) et lacunaires (V) sur une dislocation vis calculées dans le fer par différents auteurs.

L'énergie de cœur dépendant du rayon de cœur r_c pour laquelle elle est définie, on peut se demander si il en est de même pour l'énergie de formation d'un décrochement. On montre (annexe B.1) que le terme linéaire apparaissant dans l'expression 3.1 de l'énergie de cœur d'une dislocation mixte à forte composante vis ne dépend pas de r_c, dès lors que l'énergie élastique passe par un minimum pour l'orientation vis. Par contre, le terme suivant dans le développement, terme proportionnel à θ^2, dépend de r_c. Par conséquent, l'énergie de formation d'un décrochement est indépendante de la valeur du rayon de cœur utilisée pour définir l'énergie de cœur. Par contre, le domaine sur lequel une variation linéaire de l'énergie de cœur est observé en dépend.

Les choses ne sont donc pas aussi simple dès lors qu'on souhaite définir l'énergie de formation d'un décrochement pour une orientation où l'énergie élastique n'est pas minimale. La méthode employée ici conduit alors à une énergie de formation dépendant de la valeur choisie pour le rayon de cœur r_c.

3.3 Barrières de Peierls

Nous avons calculé les barrières de Peierls pour six dislocations différentes du système de glissement $1/2\langle 111\rangle\{110\}$. Cette barrière de Peierls est la barrière énergétique que la dislocation doit franchir pour passer d'une position stable (vallée de Peierls) à une autre position stable immédiatement voisine. Nous utilisons pour ce calcul des conditions aux limites tri-périodiques et donc un dipôle de dislocation. Le calcul est effectué avec un potentiel empirique (potentiel EAM de Mendelev et Ackland [36]). Il serait donc possible d'utiliser des conditions aux limites semi-périodiques afin de modéliser une dislocation isolée [15,68]. Néanmoins, l'idée étant de développer une méthode

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

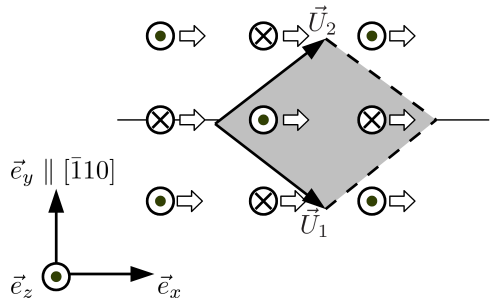


FIGURE 3.3 – Schéma du réseau périodique de dislocations utilisé pour calculer les barrières de Peierls hors contrainte. Les flèches blanches indiquent le mouvement des dislocations.

de calcul de la barrière de Peierls compatible avec les codes de calcul ab initio, nous avons préféré garder des conditions aux limites tri-périodiques.

Nous utilisons la méthode NEB (Nudged Elastic Band) [69] pour le calcul de la barrière. Entre l'état initial et l'état final, les deux dislocations, de signe opposé, ont été chacune déplacées d'une vallée de Peierls, ce déplacement étant de même signe pour les deux dislocations (Fig. 3.3). Ceci permet de maintenir constante, le long de la barrière, la distance entre les deux dislocations formant le dipôle. Il n'y a donc pas de variation d'énergie élastique le long du chemin et la variation d'énergie obtenue par simulation atomique correspond directement à la barrière de Peierls multipliée par le nombre de dislocations et leur longueur. À noter que ceci n'a un sens que si la symétrie du système de glissement est telle qu'il est équivalent pour une dislocation de se déplacer dans le sens positif ou négatif. Ainsi la méthode s'applique parfaitement au glissement d'une dislocation vis $1/2\langle 111\rangle$ glissant dans un plan $\{110\}$, mais pas dans un plan $\{112\}$ à cause de la symétrie mâclage / anti-mâclage.

Le calcul NEB nous donne la variation de l'énergie en fonction d'une coordonnée de réaction ζ.[2] Afin d'obtenir la variation de l'énergie de la dislocation en fonction de sa position, il nous faut définir pour chaque coordonnée de réaction la position x_{D} de la dislocation. Pour obtenir cette position x_{D}, nous passons par la discontinuité de déplacement $D(x)$ ("disregistry" en anglais) créée par la dislocation. Cette discontinuité $D(x)$ se définit comme la différence de déplacement entre les atomes situés immédiatement au dessus du plan de glissement de la dislocation et ceux immédiatement en dessous, x repérant la position de ces atomes dans la direction de glissement. Cette

2. Cette coordonnée de réaction ζ est généralement la projection dans la direction de migration du vecteur définissant les positions des N atomes : $\zeta = (\vec{X} - \vec{X}^{\mathrm{I}}) \cdot (\vec{X}^{\mathrm{F}} - \vec{X}^{\mathrm{I}})/\|\vec{X}^{\mathrm{F}} - \vec{X}^{\mathrm{I}}\|^2$, où $\vec{X}$, $\vec{X}^{\mathrm{I}}$, et $\vec{X}^{\mathrm{F}}$ sont les vecteurs de dimension $3N$ définissant respectivement la configuration intermédiaire, initiale et finale.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

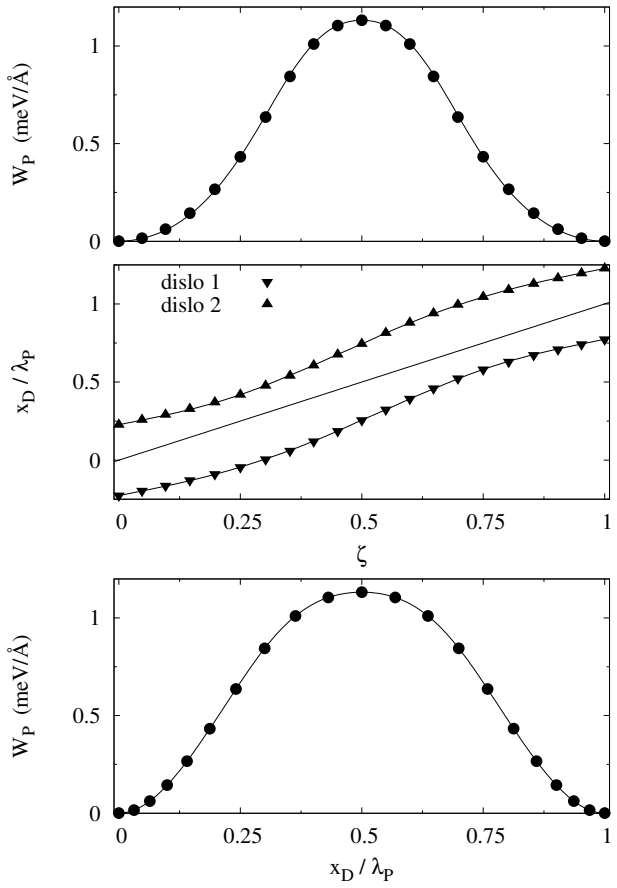


FIGURE 3.4 – Potentiel de Peierls W_P de la dislocation mixte $\langle 110 \rangle$ ($\theta = 35.3°$). ζ est la coordonnée de réaction et x_D la position de la dislocation. La distance entre vallées de Peierls est $\lambda_\mathrm{P} = a/2$.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

fonction est directement extraite de nos simulations atomiques. Peierls [70] et Nabarro [71] ont construit un modèle conduisant à une expression simple de cette fonction $D(x)$. Selon ce modèle [4], une dislocation ayant un vecteur de Burgers de norme b et située en x_D crée une discontinuité de déplacement

$$D(x) = \frac{b}{\pi}\left\{\arctan\left[\frac{x-x_\mathrm{D}}{\eta}\right]+\frac{\pi}{4}\right\}, \tag{3.2}$$

η étant l'étalement de la dislocation. Pour non plus une dislocation isolée mais un réseau périodique de dislocations de période L, cette expression devient [37]

$$D_L(x) = \frac{b}{\pi}\left\{\arctan\left[\frac{\tan\left(\frac{\pi}{L}[x-x_\mathrm{D}]\right)}{\tanh\left(\frac{\pi\eta}{L}\right)}\right]+\pi\left\lfloor\frac{x-x_\mathrm{D}}{L}+\frac{1}{2}\right\rfloor\right\}, \tag{3.3}$$

où $\lfloor\cdot\rfloor$ est la fonction partie entière. Dans le cas du réseau périodique représenté sur la figure 3.3, la discontinuité résulte de la superposition des deux réseaux périodiques $\pm b$, conduisant donc à l'expression $D(x) = D_L(x) - D_L(x - L/2)$. L'ajustement, via les paramètres x_D et η, de cette fonction sur la discontinuité extraite de la simulation atomique nous permet donc d'obtenir la position de la dislocation pour chaque coordonnée de réaction ζ.

Connaissant à présent non seulement la variation d'énergie $W_\mathrm{P}(\zeta)$, mais également la position de la dislocation $x_\mathrm{D}(\zeta)$, il est possible de reconstruire la fonction $W_\mathrm{P}(x_\mathrm{D})$. La méthode est illustrée sur la figure 3.4 pour la dislocation mixte $\langle 110\rangle$. On remarque sur cette figure que la position des dislocations ne varie pas linéairement avec la coordonnée de réaction, conduisant donc à des courbes différentes pour les fonctions $W_\mathrm{P}(\zeta)$ et $W_\mathrm{P}(x_\mathrm{D})$. Ceci prendra toute son importance lorsque nous déterminerons la contrainte de Peierls à partir de cette courbe en considérant la dérivée de l'énergie par rapport à la position de la dislocation.

Les barrières de Peierls que nous obtenons pour les différentes orientations de la dislocation dans le fer c.c. avec le potentiel EAM de Mendelev [36] sont présentées sur la figure 3.5. Pour la dislocation vis, la hauteur de la barrière que nous obtenons (4.6 meV/Å) est en accord avec la valeur obtenue par Rodney et Proville en utilisant des conditions aux limites différentes. Cette barrière pour la vis est en double bosse. Il s'agit d'un artefact bien connu des potentiels EAM de Mendelev [36, 63], les calculs ab initio de cette même barrière montrant qu'elle devrait être en simple bosse [19, 20, 72]. À noter que la dislocation mixte $\langle 110\rangle$ présente également une barrière en double bosse, le minimum intermédiaire est néanmoins moins marqué que dans le cas de la vis. L'amplitude de la barrière de Peierls varie beaucoup avec l'orientation de la dislocation. Comme attendu, la dislocation coin présente une barrière de faible hauteur (0.35 meV/Å), soit un ordre de grandeur plus bas que la vis. Par contre, la vis n'est pas l'orientation pour laquelle la barrière est la plus élevé : la dislocation mixte $\langle 111\rangle$ possède une barrière plus élevée (6 meV/Å).

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

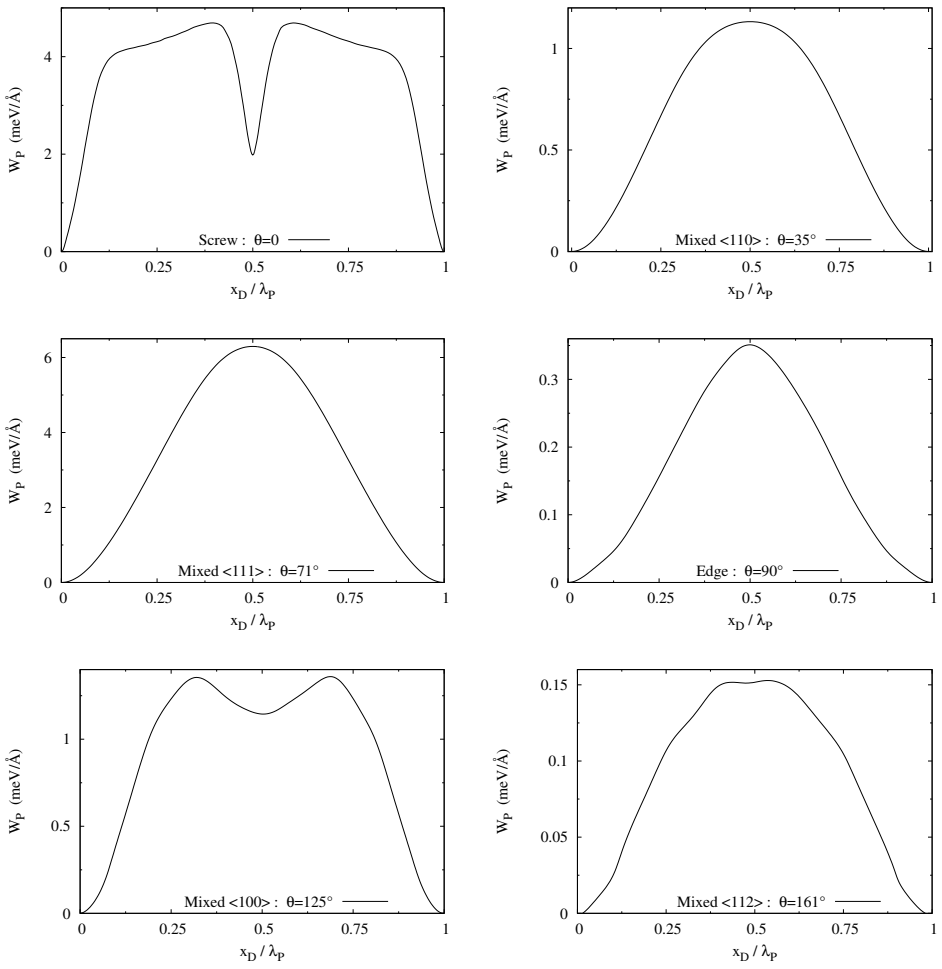


FIGURE 3.5 – Potentiel de Peierls pour différents caractères du système de glissement $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ dans le fer.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

3.4 Contrainte de Peierls

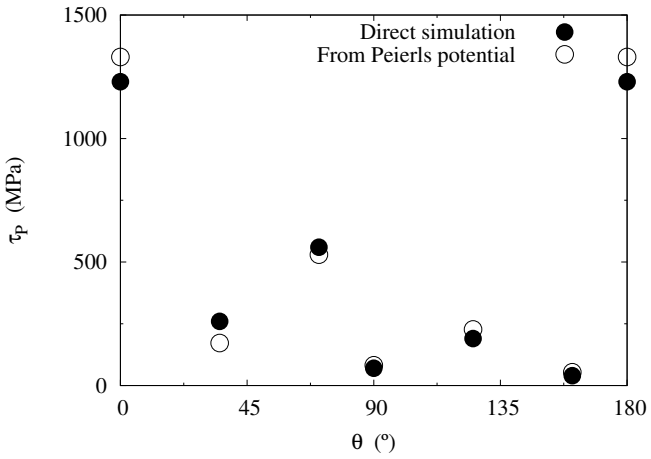


FIGURE 3.6 – Contrainte de Peierls τ_P pour différents caractères θ d'une dislocation $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ dans le fer. τ_P a été calculée soit par simulation atomistique directe (statique moléculaire), soit à partir de la pente maximale du potentiel de Peierls.

La contrainte de Peierls est la contrainte seuil au-delà de laquelle la dislocation peut glisser sans activation thermique. On peut la calculer dans nos simulations atomiques en imposant progressivement une contrainte et en relaxant les positions atomiques pour chaque incrément de contrainte. La contrainte de Peierls est alors la contrainte à partir de laquelle un mouvement des dislocations est observé. Avec nos conditions aux limites tri-périodiques, nous n'imposons pas véritablement une contrainte mais une déformation correspondant à la contrainte visée (Eq. 1.2).

Les résultats obtenus dans le fer pour différentes orientations de la dislocation sont présentés sur la figure 3.6. Comme attendu, la dislocation vis possède la contrainte de Peierls maximale, ce qui confirme son rôle important dans la plasticité du fer c.c.. La valeur que nous obtenons, $\tau_P = 1230 \pm 10\,\text{MPa}$, est très proche de celle obtenue avec le même potentiel par Chaussidon *et al.* [73]. Les méthodes de simulation étant différentes (conditions aux limites tri-périodiques dans notre cas et semi-périodiques pour Chaussidon *et al.*), cet accord valide, l'une par rapport à l'autre, ces différentes approches. [3] À noter que cette valeur pour le fer issue des simulations atomiques est très supérieure à la valeur déduite des mesures expérimentales,

3. Le même accord est obtenu pour la dislocation coin entre nos calculs ($\tau_P = 70 \pm 10\,\text{MPa}$) et les simulations de Terentyev *et al.* [59,62] ($\tau_P = 80 \pm 10\,\text{MPa}$) qui, tout comme Chaussidon *et al.* [73], utilisent des conditions aux limites semi-périodiques.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

$\tau_P = 370\,\text{MPa}$ pour Kuramoto *et al.* [74] et $\tau_P = 380\,\text{MPa}$ pour Caillard [75]. Cet écart entre résultats expérimentaux et simulations atomiques est connu et apparait dans toute étude numérique des propriétés de glissement d'une dislocation vis dans un métal de transition c.c., que les simulations atomiques soient réalisées en ab initio ou avec un potentiel empirique. Récemment, Proville *et al.* [76] ont montré qu'il pouvait s'expliquer par une contribution quantique des vibrations atomiques à l'énergie de formation d'un décrochement sur une dislocation vis. Cette contribution, non prise en compte dans les approches standards de modélisation atomique, conduit à un abaissement de la contrainte de Peierls jusqu'à une valeur compatible avec les mesures expérimentales.

L'orientation ayant la contrainte de Peierls la plus élevée après la vis est la dislocation mixte de vecteur ligne $[11\bar{1}]$ et de vecteur de Burgers $1/2[111]$ (caractère $\theta \simeq 70.5°$). Nos simulations confirment donc les résultats de Cai *et al.* [40,50,51], montrant que cette orientation $[11\bar{1}]$ glisse plus difficilement que les autres orientations.

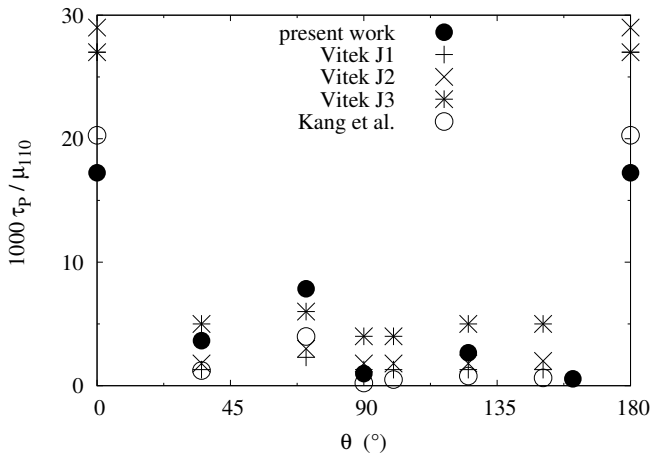


FIGURE 3.7 – Comparaison des contraintes de Peierls obtenues dans ce travail avec celles obtenues par Vitek et Yamaguchi [49] et par Kang *et al.* [51] avec des potentiels empiriques représentatifs de différents métaux de transition c.c.. Les contraintes de Peierls τ_P ont été normalisées par le module de cisaillement dans le plan $\{110\}$, $\mu_{110} = (C_{11} - C_{12} + C_{44})/3$.

Pour pouvoir comparer plus en détails nos résultats avec ceux disponibles dans la littérature, nous avons reporté sur la figure 3.7 les variations de la contrainte de Peierls τ_P avec le caractère de la dislocation, en normalisant τ_P par le module de cisaillement dans le plan de glissement. Le potentiel EAM de Mendelev utilisé dans notre étude est celui conduisant à la moins grande

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

différence des contraintes de Peierls entre la direction vis et la direction mixte $[11\bar{1}]$. Ce potentiel est également celui conduisant aux plus fortes variations de la contrainte de Peierls d'une orientation mixte à une autre. Au contraire, les potentiels de paire utilisés par Vitek et Yamaguchi [48, 49] conduisent à des contraintes de Peierls variant assez peu pour les dislocations ayant une composante coin, seule l'orientation purement vis se démarquant.

3.5 Du potentiel à la contrainte de Peierls

Plutôt que de calculer directement par simulations atomiques la contrainte de Peierls comme nous l'avons fait dans la section précédente, cette contrainte peut se définir à partir du potentiel de Peierls $W_{\mathrm{P}}(x_{\mathrm{D}})$. En effet, sous une contrainte appliquée τ, l'énergie de la dislocation en fonction de sa position x_{D} dans son plan de glissement s'écrit $\Delta E(x_{\mathrm{D}}) = W_{\mathrm{P}}(x_{\mathrm{D}}) - \tau b x_{\mathrm{D}}$, le second terme correspondant au travail des forces de Peach-Koehler. La contrainte de Peierls est alors la valeur critique de la contrainte pour laquelle la fonction $\Delta E(x_{\mathrm{D}})$ ne présente plus de maximum : au-delà de cette contrainte, la dislocation peut glisser sans activation thermique. Ceci conduit donc à la définition

$$\tau_{\mathrm{P}} = \frac{1}{b} \operatorname{Max}\left(\frac{\partial W_{\mathrm{P}}}{\partial x_{\mathrm{D}}}\right). \tag{3.4}$$

Les contraintes de Peierls obtenues avec cette méthode sont comparées aux contraintes déduites des simulations directes sur la figure 3.6. Cette figure montre un accord très raisonnable entre les contraintes de Peierls calculées avec les deux méthodes, illustrant donc la cohérence des deux approches. Pour tenter néanmoins d'expliquer l'écart qui subsiste sur la valeur obtenue pour τ_{P}, deux pistes peuvent être évoquées. Tout d'abord, l'équation 3.4 montre que la valeur de la contrainte de Peierls calculée à partir du potentiel de Peierls dépend de la définition utilisée pour la position de la dislocation. Ici, cette position a été définie à partir de la discontinuité de déplacement observée dans le plan de glissement (§3.3). Néanmoins, d'autres définitions sont possible, conduisant ainsi à des variations sur la contrainte de Peierls obtenue au final via l'équation 3.4. Rodney et Proville [68] ont également introduit une éventuelle dépendance du potentiel de Peierls $W_{\mathrm{P}}(x_{\mathrm{D}})$ avec la contrainte appliquée, si bien que le potentiel entrant dans l'équation 3.4 ne devrait pas être celui que nous avons calculé hors contrainte (§3.3) mais le potentiel de Peierls calculé pour une contrainte appliquée correspondant à la contrainte de Peierls. Ces deux points sont en fait intimement liés. En effet, le potentiel de Peierls sous contrainte s'obtient en calculant, avec la méthode NEB [69] par exemple, la barrière d'énergie ΔE entre deux configurations stables voisines de la dislocation tout en imposant une contrainte τ à la boîte de simulation. Le travail de cette contrainte, $\tau b x_{\mathrm{D}}$, est ensuite retranché de la variation d'énergie ΔE afin d'obtenir le potentiel de Peierls W_{P}. Toute erreur

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

sur la définition de la position de la dislocation x_D entrainera une erreur sur le travail des forces de Peack-Koehler et donc sur le potentiel de Peierls obtenu au final. Pour une contrainte appliquée τ proche de la contrainte de Peierls, cette erreur n'est pas négligeable puisque le travail des forces de Peach-Koehler est alors du même ordre de grandeur que le potentiel de Peierls. Ce point est abordé plus en détails dans l'annexe C où nous calculons le potentiel de Peierls sous contrainte pour la dislocation vis et la dislocation mixte $[11\bar{1}]$ en utilisant plusieurs définitions possibles pour la position de la dislocation. Ces différentes définitions conduisent à des potentiels de Peierls dépendant plus ou moins de la contrainte appliquée.

Puisque le calcul de la contrainte de Peierls τ_P à partir de la dérivée du potentiel de Peierls via l'équation 3.4 est potentiellement imprécis, il peut apparaître plus pertinent de calculer cette contrainte de Peierls directement par simulations atomiques, comme nous l'avons fait dans la section précédente. Ceci est d'autant plus vrai qu'il est alors possible d'utiliser des conditions aux limites autres que tri-périodiques, des bords flexibles contrôlés par les fonctions de Green de réseau en particulier [6, 10, 77], que le calcul s'effectue en potentiel empirique ou en ab initio. Néanmoins, le fait de passer par le potentiel de Peierls pour calculer la contrainte de Peierls présente des avantages. En effet, cette contrainte de Peierls n'est que la contrainte au-delà de laquelle la dislocation se met en mouvement en l'absence d'activation thermique, c'est-à-dire à 0 K. À température finie, l'activation thermique va diminuer cette contrainte. Connaissant le potentiel de Peierls, il est possible de prédire la contrainte d'écoulement en fonction de la température en utilisant un modèle de tension de ligne et un modèle de germination de doubles décrochements [78,79]. Les travaux de Rodney et Proville [68,80] ont montré, grâce à une comparaison avec des simulations de dynamique moléculaire, qu'un tel modèle parvenait à prédire de façon quantitative l'évolution en fonction de la température de la mobilité d'une dislocation vis dans le fer c.c.. Ce modèle peut même être entièrement paramétré à partir de calculs ab initio [81]. Si on ne dispose pas du potentiel de Peierls, mais seulement de la contrainte de Peierls, il n'est par contre pas possible d'obtenir la loi de mobilité en fonction de la température, à moins de reconstruire un potentiel ad-hoc à partir de la contrainte de Peierls [82]. Ceci justifie donc pleinement les efforts développés pour calculer précisément le potentiel de Peierls.

Pour la dislocation vis dans les métaux de transition c.c., la notion de potentiel de Peierls doit être étendue à deux dimensions. En effet, cette dislocation vis, ne possédant pas d'étalement dans un plan donné, peut théoriquement glisser dans toutes les directions perpendiculaires à son vecteur ligne [111], ce qui conduit à la définition du potentiel de Peierls $W_\mathrm{P}(x_\mathrm{D}, y_\mathrm{D})$, x_D et y_D étant la position de la dislocation projetée dans les directions $[\bar{1}\bar{1}2]$ et $[1\bar{1}0]$ par exemple. Connaissant cette fonction à deux dimensions, on peut alors prédire l'écart à la loi de Schmid, c'est-à-dire comment la contrainte de Peierls évolue lorsque l'angle χ entre le plan de cission résolue maximale

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

et le plan de glissement $(\bar{1}10)$ varie. L'évolution avec la température de cet écart à la loi de Schmid peut également être modélisée, toujours avec un modèle de tension de ligne [83–85]. La construction de ce potentiel $W_{\mathrm{P}}(x_{\mathrm{D}}, y_{\mathrm{D}})$ nécessite de pouvoir définir la position à deux dimensions $(x_{\mathrm{D}}, y_{\mathrm{D}})$ de la dislocation vis, et non plus seulement sa position projetée dans le plan de glissement, et de calculer la variation d'énergie due à la présence d'une dislocation en ce point. Dans ce but, nous avons développés plusieurs méthodes pour définir la position de la dislocation : une extension de la méthode basée sur la discontinuité de déplacement afin d'autoriser un mouvement hors du plan de glissement [72], un ajustement des cartes de Vitek (*cf.* annexe C), une méthode basée sur les variations de contrainte (*cf.* annexe C), d'autres méthodes étant par ailleurs disponibles dans la littérature [72, 85, 86]. Ce sujet, en plein développement actuellement, nécessite encore tout un travail de validation pour voir dans quelle mesure une approche basée sur un calcul du potentiel de Peierls à deux dimensions permet de décrire quantitativement l'évolution avec la température de l'écart à la loi de Schmid.

3.6 Conclusion et perspectives

Cette étude illustre donc comment les propriétés de cœur d'une dislocation peut varier avec le caractère de la dislocation. En particulier, nous avons pu voir que la contrainte de Peierls change beaucoup d'un caractère à l'autre. Dans le cas du fer, nous trouvons que, comme attendu, la dislocation vis est la plus difficile à faire glisser. La dislocation mixte de vecteur ligne $\langle 111 \rangle$ glisse également difficilement. Le même résultat a été obtenu par Kang *et al.* [51] avec un potentiel empirique représentatif de Ta, en considérant un nombre d'orientations beaucoup plus important que nous ne l'avons fait ici. Ce résultat, qui semble donc commun aux métaux de transition c.c., est surprenant car on s'attend alors expérimentalement à observer des dislocations s'alignant dans ces directions mixtes $\langle 111 \rangle$, tout comme elles le font pour les directions vis. Jusqu'à présent, un tel facettage des microstructures de dislocations n'a pas été mis en évidence, en particulier dans les essais de traction in situ au MET. Il se peut que la différence de contrainte de Peierls entre les orientations vis et mixte $\langle 111 \rangle$ soit néanmoins trop faible pour pouvoir observer ce facettage, ou alors qu'il ne soit présent qu'à très basse température.

Cette contrainte de Peierls importante pour la dislocation mixte $\langle 111 \rangle$ ayant été obtenue avec des potentiels empiriques, la question de sa validité se pose également. En effet, il est connu que les potentiels empiriques utilisés, potentiel EAM ou du second moment, ne sont pas pleinement adaptés pour décrire les métaux de transition. On ne peut donc pas écarter l'hypothèse que la contrainte de Peierls élevée de cette dislocation mixte $\langle 111 \rangle$ soit un artefact de tels potentiels. Pour répondre à cette question, nous avons essayé de

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

calculer ab initio dans le fer cette contrainte de Peierls, en utilisant le code ab initio SIESTA avec les paramètres utilisées par Lisa Ventelon dans son étude de la dislocation vis [19, 20]. Ceci a constitué le sujet de stage de Matthieu Albagnac. Malheureusement, la méthode de simulation que nous avons retenue, simulation d'un dipôle en conditions aux limites tri-périodiques, ne nous a pas permis d'estimer la contrainte de Peierls : les effets de taille de boîte se sont révélés trop importants pour pouvoir conclure. Il sera donc nécessaire, à l'avenir, de changer de méthode de simulation pour pouvoir estimer ab initio la contrainte de Peierls de cette orientation. La méthode de la dislocation isolée dans un agrégat à bord flexible [6, 10, 77] apparaît comme la plus adaptée pour effectuer ce calcul.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Chapitre 3

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Chapitre 4

Dilatation de cœur de la dislocation vis dans le fer

Articles associés:

- Clouet E., Ventelon L. et Willaime F. *Dislocation core energies and core fields from first principles*. Phys. Rev. Lett. **102** (2009), p. 055502.
- Clouet E. *Dislocation core field. I. Modeling in anisotropic linear elasticity theory*. Phys. Rev. B **84** (2011), p. 224111.
- Clouet E., Ventelon L. et Willaime F. *Dislocation core field. II. Screw dislocation in iron*. Phys. Rev. B **84** (2011), p. 224107.

Comme indiqué dans le précédent chapitre, les dislocations vis jouent un rôle prépondérant dans le développement de la déformation plastique des métaux cubique centrés (c.c.). Elles ont une contrainte de Peierls plus élevée que les autres orientations si bien que ce sont elles qui contrôlent la limite élastique. Beaucoup de travaux se sont consacrés à cette dislocation vis, en particulier des simulations atomiques dans le but d'étudier ses propriétés de cœur (structure de cœur, barrière et contrainte de Peierls, écart à la loi de Schmid). En 2000, les premiers calculs ab initio réalisés dans le molybdène et le tantale [87] ont révélés que cette dislocation vis possédait un cœur compact, ce qu'ont confirmé par la suite tous les calculs ab initio réalisés dans différents métaux de transition c.c.. Ceci a remis en cause la vision généralement admise d'une dislocation vis glissant difficilement à cause de son cœur étalé dans les trois plans $\{110\}$ auxquels appartient le vecteur de Burgers $1/2\langle 111\rangle$, une structure prédite par la plupart des potentiels empiriques [39–41]. Dès lors, il est apparu nécessaire de prendre finement en compte la structure électronique, par calcul ab initio par exemple, pour modéliser à l'échelle atomique la dislocation vis dans les métaux de transition c.c..

Les calculs ab initio réalisés au SRMP par Lisa Ventelon [19, 20] pour

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

étudier les propriétés de cœur de la dislocation vis dans le fer ont révélé un effet nouveau. Le cœur de cette dislocation induit un champ élastique de dilatation qui vient se superposer au champ élastique de Volterra [13]. Nous décrivons dans ce chapitre comment ce champ de dilatation se manifeste et quelles en sont les conséquences pour l'étude ab initio de la dislocation vis. Puis nous présenterons le modèle élastique que nous avons développé pour prendre en compte ce champ de dilatation, et nous conclurons sur ses éventuelles conséquences physiques.

4.1 Énergie de cœur des différentes configurations

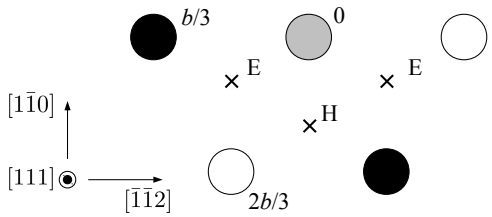


FIGURE 4.1 – Définition des différentes positions de la dislocation vis $\vec{b} = 1/2[111]$ perpendiculairement à son vecteur ligne. Les ronds représentent les colonnes atomiques [111], avec une couleur différente suivant qu'elles se situent à la cote $z = 0$, $b/3$ ou $2b/3$. Les positions E correspondent aux configurations cœur facile de la dislocation vis et la position H à la configuration cœur difficile.

Il est théoriquement possible de définir l'énergie de la dislocation vis en fonction de sa position dans le plan (111) perpendiculaire à son vecteur de Burgers, conduisant donc à un potentiel de Peierls à deux dimensions. Ceci présente un intérêt majeur car, comme nous l'avons déjà souligné au paragraphe 3.5, on peut dès lors en déduire la variation avec la température de la contrainte d'écoulement, ainsi que l'écart à la loi de Schmid [83–85]. Parmi les différentes positions accessibles à la dislocation, certaines présentent des propriétés particulières à cause de la symétrie du cristal c.c.. Ainsi les positions dites de cœur facile, E pour "easy", et cœur difficile, H pour "hard", sont nécessairement des extrema du potentiel de Peierls 2D. Ces positions sont situées au centre de gravité de trois colonnes atomiques $\langle 111 \rangle$ voisines (Fig. 4.1). Dans la position E, la dislocation inverse localement l'hélicité du réseau : les trois colonnes atomiques $\langle 111 \rangle$ passent par exemple des cotes $z = 0$, $b/3$ et $2b/3$ dans le cristal parfait, aux cotes $z = 0$, $2b/3$ et $b/3$ dans le cristal disloqué. Cette position E doit normalement être le minimum absolu du potentiel de Peierls 2D, correspondant donc à la position la plus stable de la dislocation. Dans la position H, la dislocation ramène les trois

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

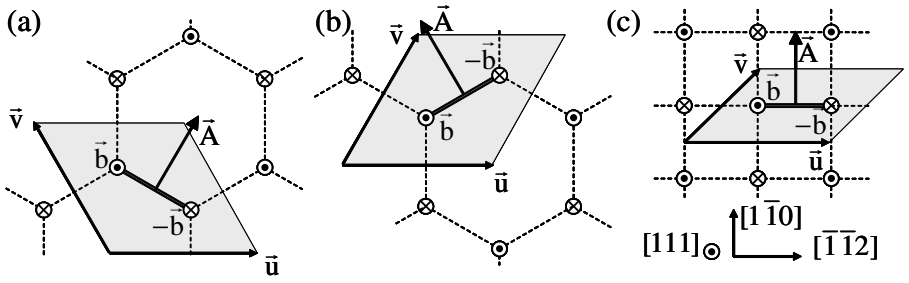


FIGURE 4.2 – Réseaux périodiques utilisés pour les calculs ab initio de la dislocation vis : arrangements triangulaires (a) T et (b) AT ; (c) arrangement quadripolaire. $\vec{b} = \frac{1}{2}[111]$ pour le cœur facile et $\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ pour le cœur difficile.

colonnes atomiques $\langle 111 \rangle$ à la même cote. Sur des considérations stériques, cette configuration est généralement envisagée comme un maximum du potentiel de Peierls, mais les récents calculs ab initio réalisés dans le fer [72, 85] montrent qu'elle peut également correspondre au point col entre deux vallées de Peierls. Dans tous les cas, la différence d'énergie entre les configurations cœur facile et cœur difficile constitue un maximum de la barrière de Peierls de la dislocation vis. Il est donc important de voir si il est possible de calculer ab initio cette différence d'énergie, ceci constituant une première étape nécessaire avant l'évaluation du potentiel de Peierls 2D.

La différence d'énergie entre les configurations cœur facile et cœur difficile a été calculée ab initio dans le fer par Lisa Ventelon [13, 19, 20] en utilisant le code SIESTA. Ces simulations reposent sur une approche dipôle en conditions aux limites tri-périodiques (§1.1.3). Différents arrangements périodiques ont été utilisés dans cette étude :

- deux réseaux périodiques triangulaires (Fig. 4.2a et b), où les dislocations sont positionnées en nid d'abeille. Ces réseaux, initialement introduits par Frederiksen et Jacobsen [88], ont l'avantage de préserver la symétrie d'ordre 3 de la direction [111]. Ils sont respectivement dénommés T et AT pour "twinning" et "anti-twinning" selon que le cisaillement du plan $\{112\}$ lors de la création du dipôle s'effectue dans la direction de maclage ou d'anti-maclage.
- un réseau quadripolaire (Fig. 4.2c).

Pour un réseau donné, les configurations cœur facile et cœur difficile sont obtenues en positionnant les dislocations au même point, le centre de gravité d'un triangle de trois colonne atomiques, mais en inversant le signe du vecteur de Burgers de chacune des dislocations composant le dipôle. Prenant en compte uniquement le champ de Volterra créé par les dislocations, l'énergie élastique est proportionnelle au carré de la norme du vecteur de Burgers.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

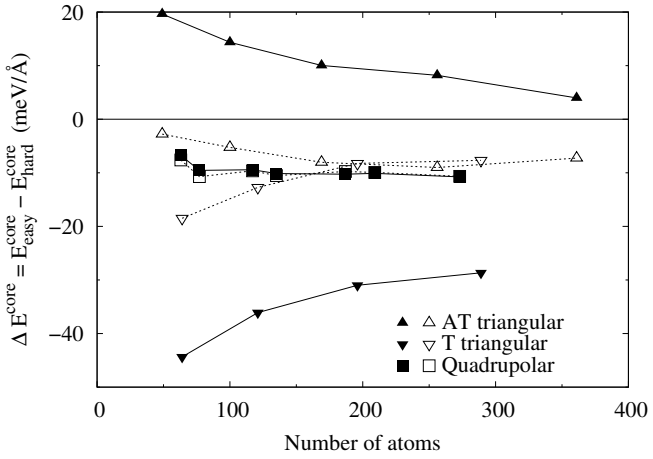


FIGURE 4.3 – Différence d'énergie entre les cœurs facile et difficile. Les symboles pleins correspondent aux énergies de cœur obtenues lorsque seul le champ de Volterra est pris en compte dans le calcul de l'énergie élastique. Pour les symboles ouverts, le champ de dilatation du cœur est également pris en compte pour calculer l'énergie élastique ($r_c = 3$ Å).

Par conséquent, cette énergie élastique est la même que les dislocations soient dans leur configuration cœur facile ou cœur difficile. La différence d'énergie de cœur entre ces deux configurations est donc simplement obtenue en prenant la différence des énergies directement issues des calcul ab initio. Cette différence d'énergie est représentée sur la figure 4.3 avec des symboles pleins pour les différents arrangements périodiques et différentes tailles de boîte. Le résultat obtenu dépend fortement du réseau périodique utilisé. Le réseau triangulaire T conduit à un cœur difficile plus stable que le cœur facile, tandis que le réseau triangulaire AT et le réseau quadripolaire conduisent à la stabilité inverse, sans pour autant donner la même différence d'énergie. Le modèle élastique qui sera développé plus loin permet de montrer que la convergence de cette différence d'énergie avec le nombre d'atomes N est proportionnelle à $N^{-1/2}$. Le nombre d'atomes qu'il est possible de considérer dans un calcul ab initio ne permet donc pas d'obtenir une grandeur convergée.

4.2 Champ de dilatation du cœur

Afin de comprendre comment notre approche doit être enrichie pour conduire à des différences d'énergie ne dépendant pas de la forme et de la taille de la boîte de simulation, il est utile de jeter un œil au champ de déplacement créé par le réseau périodique de dislocations. Si nous nous inté-

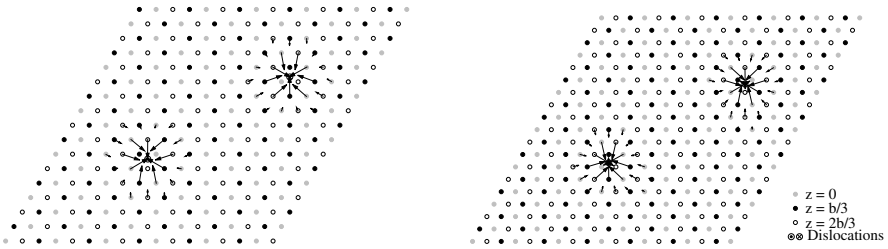
© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

(a) champ de déplacement ab initio

(b) après soustraction du champ de Volterra



(c) après soustraction des champs de Volterra et de cœur

FIGURE 4.4 – Champ de déplacement dans le plan (111) créé par un dipôle de dislocations vis pour un arrangement triangulaire de type AT à gauche et T à droite. En (a), le champ total obtenu par calcul ab initio est représenté. En (b), la contribution du champ de Volterra a été retranchée. En (c), la contribution du champ de dilatation de cœur a été retranchée en plus de la contribution de Volterra. Les vecteurs correspondant aux déplacement dans le plan (111) ont été agrandis d'un facteur 50. Les déplacements plus petits que 0.01 Å ne sont pas représentés. Les déplacements des six atomes appartenant au cœur des deux dislocations ne sont pas dessinés sur la figure (c).

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

ressons au déplacement créé dans le plan (111) perpendiculaire à la ligne de dislocation, *i.e.* la composante coin, les calculs ab initio conduisent au champ de déplacement représenté sur la figure 4.4a. Une partie de cette composante coin provient du champ élastique de Volterra à cause de l'anisotropie élastique. Soustrayant à présent ce champ élastique de Volterra du champ de déplacement donné par les calculs ab initio, on obtient le champ résiduel représenté sur la figure 4.4b. Ce champ résiduel ressemble à une combinaison d'expansions 2-D localisées au niveau des dislocations.

Un tel champ résiduel n'est pas inclus dans la solution de Volterra décrivant le champ élastique d'une dislocation. Pour autant, Eshelbi *et al.* [89] ont montré qu'une dislocation pouvait conduire à ce champ. En effet, selon ces auteurs, le champ élastique créé en un point repéré par ses coordonnées cylindrique r et θ par une dislocation rectiligne infinie s'écrit sous la forme d'une série de Laurent :

$$\vec{u}(r,\theta) = \vec{v}(\theta)\ln(r) + \vec{u}_0(\theta) + \vec{u}_1(\theta)\frac{1}{r} + O\left(\frac{1}{r^2}\right) \tag{4.1}$$

Généralement, seuls les deux premiers termes de cette série sont pris en compte : ceci correspond à la solution de Volterra décrivant le champ élastique à longue distance nécessaire pour créer la discontinuité de déplacement définissant la dislocation.

Proche du cœur de la dislocation, le troisième terme de l'équation 4.1 peut également devenir important. Celui-ci correspond au champ de cœur de la dislocation. Il provient à la fois de perturbations dues à la nature atomique du cœur et également à l'anharmonicité du cristal, notamment dans la zone de cœur fortement déformée. Un tel champ de cœur peut être modélisé, en théorie élastique linéaire, par des dipôles de lignes de force situés le long de la ligne de dislocation [90, 91]. Le champ de cœur est alors pleinement caractérisé par son dipôle élastique M_{ij} correspondant au premier moment de la distribution de lignes de forces. [1] Des comparaisons avec des simulations atomiques ont montré que cette représentation élastique du champ de cœur était pertinente [6, 90, 92–94].

La figure 4.5 illustre le concept de modèle de dipôle élastique utilisé pour modéliser le champ de cœur. Sur cette figure, deux lignes de force de même amplitude F_x, mais de signe opposé, sont situées à une distance $\pm\delta_x$ de la dislocation. Le dipôle correspondant est donné par le premier moment, soit $M_{xx} = 2\delta_x F_x$. De même, sur cette figure est présent un dipôle $M_{yy} = 2\delta_y F_y$. Le tenseur du dipôle élastique représenté sur cette figure a pour seules composantes non nulles M_{xx} et M_{yy}. Dans le cas de la dislocation vis $1/2\langle 111\rangle$,

1. Ce modèle de dipôle utilisé pour représenter un défaut en théorie élastique est décrit plus en détails dans l'annexe D pour un défaut ponctuel. L'adaptation à un défaut linéaire comme le cœur d'une dislocation est immédiate.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

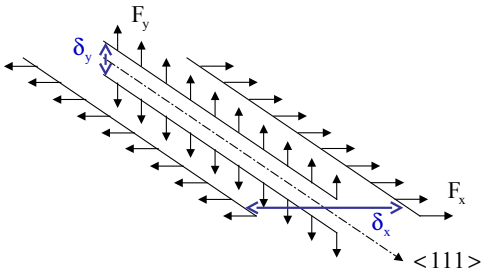


FIGURE 4.5 – Schéma représentatif du dipôle de lignes de forces utilisé pour modéliser le champ de cœur de la dislocation vis.

la symétrie du cristal c.c. impose en outre que $M_{xx} = M_{yy}$.[2] Ce modèle de dipôle élastique est l'analogue pour un défaut linéaire du dipôle élastique obtenu avec une distribution de forces ponctuelles utilisé pour modéliser un défaut ponctuel en élasticité [28, 95–97]. Il est en tout point équivalent à la limite infinitésimale du modèle d'inclusion d'Eshelby, l'inclusion étant ici décrite par une distribution de forces au lieu d'une déformation propre. Pour la dislocation vis $1/2\langle 111\rangle$, l'inclusion d'Eshelby [98, 99] à considérer serait une inclusion cylindrique de section circulaire.

Hirth et Lothe [100] ont développé la modélisation élastique du champ de cœur des dislocations en s'appuyant sur cette représentation en terme de dipôle élastique, tout en prenant en compte l'anisotropie élastique grâce au formalisme des équations sextiques de Stroh [16, 17]. Nous avons étendu ce modèle afin de prendre en compte le champ de cœur dans le calcul de l'énergie élastique des dislocations et de leur énergie d'interaction avec une contrainte extérieure. En effet, peu d'études [90, 94, 101] avaient jusqu'à présent considéré ce champ de cœur dans l'énergie élastique et ces études supposaient soit un comportement élastique isotrope, soit une symétrie particulière des constantes élastiques incompatible avec la dislocation vis $1/2\langle 111\rangle$. L'approche que nous avons développé repose sur le formalisme de Stroh et s'applique donc à tout cristal, quelque soit l'anisotropie élastique. Cette approche est présentée dans l'article [102] et a été implémentée dans le code Babel. On montre en particulier que l'énergie élastique d'une dislocation rectiligne infinie isolée contient un terme supplémentaire. L'équation 2.3 devient alors

$$E_{\text{dislo}}^{\text{elas}} = \frac{1}{2} b_i K_{ij}^0 b_j \ln\left(\frac{R_\infty}{r_c}\right) + \frac{1}{2} M_{ij} K_{ijkl}^2 M_{kl} \left(\frac{1}{{r_c}^2} - \frac{1}{{R_\infty}^2}\right), \qquad (4.2)$$

où K_{ijkl}^2 est un tenseur défini positif ne dépendant que des constantes élastiques. Cette expression montre en particulier que l'énergie élastique associée

2. Ceci n'est vrai en fait que pour les arrangements triangulaires (Fig. 4.2a et b) qui respecte la symétrie du cristal. Pour l'arrangement quadripolaire, la polarisabilité du champ de cœur peut entrainer une différence entre M_{xx} et M_{yy}, ainsi que la présence de termes non diagonaux.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

au champ de cœur est concentrée proche de la dislocation, si bien qu'il est possible de considérer la limite $R_\infty \to \infty$. Quant à l'énergie d'interaction du champ de cœur avec un champ élastique externe, celle-ci est simplement donnée par

$$E_{\mathrm{c}}^{\mathrm{inter}} = -\varepsilon_{ij}^{\mathrm{ext}}(\vec{0}) M_{ij}, \tag{4.3}$$

où $\varepsilon_{ij}^{\mathrm{ext}}(\vec{0})$ est la déformation créée par le champ externe au niveau de la dislocation.

Avant de pouvoir prendre en compte le champ de cœur dans nos calculs d'énergie élastique, il reste néanmoins à déterminer, à partir de nos simulations atomiques, le dipôle élastique M_{ij} caractérisant ce champ. Nous avons montré [13, 103] que ce dipôle est proportionnel à la contrainte homogène mesurée dans la boîte de simulation lorsque les vecteurs de périodicité sont maintenus fixes. Cette contrainte étant une donnée de sortie de tout code ab initio, le champ de cœur est donc ainsi directement caractérisé, sans aucune procédure d'ajustement. En appliquant cette méthode à la dislocation vis $1/2\langle 111\rangle$ dans le fer, on obtient $M_{xx} = M_{yy} = 650 \pm 50\,\mathrm{GPa\,\AA^2}$ avec Siesta [13, 103], que la dislocation soit dans sa configuration cœur facile ou cœur difficile. Ceci correspond à une dilatation perpendiculairement à la ligne de dislocation $\delta V_\perp = (\varepsilon_{xx}^0 + \varepsilon_{yy}^0) S/2 = 3.8 \pm 0.3$ Å^2 et à une contraction parallèlement à celle-ci, $\delta V_{//} = \varepsilon_{zz}^0 S/2 = -1.3 \pm 0.2$ Å^2, le volume de formation $\delta V_\perp + \delta V_{//}$ de la dislocation étant au total positif.

Connaissant à présent le dipôle élastique M_{ij} à l'origine du champ de cœur, on modélise le champ de déplacement créé par les dislocations comme la superposition des champs élastiques de Volterra et de cœur. On voit alors que ce champ élastique est en très bon accord avec le champ directement obtenu par calcul ab initio (*cf.* Fig. 4.4c montrant la différence entre ces deux champs de déplacement pour la composante dans le plan (111) perpendiculaire à la ligne de dislocation). Un désaccord n'est observé que pour les atomes trop proches du cœur pour lesquels on atteind les limites des hypothèses de la théorie élastique.

Prenant en compte ce champ de dilatation du cœur dans le calcul de l'énergie élastique, on peut calculer l'énergie de cœur de la dislocation vis $1/2\langle 111\rangle$ pour ses deux configurations et obtenir ainsi la différence d'énergie de cœur représentée par des symboles ouverts sur la figure 4.3. On voit alors que tous les réseaux périodiques convergent, pour des tailles de boîte suffisamment grandes, vers la même différence d'énergie $E_{\mathrm{easy}}^{\mathrm{core}} - E_{\mathrm{hard}}^{\mathrm{core}} = -8 \pm 1\,\mathrm{meV\,\AA^{-1}}$, confirmant ainsi que la configuration cœur facile est plus stable que la configuration cœur difficile.

Avec l'arrangement quadripolaire (Fig. 4.2c), la différence d'énergie de cœur obtenue n'est pas affectée par la prise en compte du champ de cœur (Fig. 4.3). Ceci est tout à fait général et découle de la centrosymétrie de cet arrangement périodique conduisant à une interaction minimale entre les différentes dislocations composant cet arrangement [103]. Pour les arrangements

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

triangulaires, il y a par contre une forte influence du champ de cœur sur les différences d'énergie obtenues au final à cause d'un couplage entre ce champ de cœur et le champ de Volterra [103]. La conséquence de cette remarque est que l'arrangement quadripolaire doit être privilégié dans les calculs ab initio pour calculer l'énergie de cœur de la dislocation et ses variations.

4.3 Origine et conséquences du champ de cœur

La question de la généralité de cette dilatation du cœur de la dislocation se pose, d'autant plus que, le fer étant ferromagnétique, un couplage entre magnétisme et dilatation ne peut pas être exclu, ni un artefact de l'approche ab initio reposant sur SIESTA utilisée pour notre étude. L'examen de précédents calculs ab initio de cette même dislocation vis dans le molybdène et le tantale [87], et dans le fer et le molybdène [88] montre que ce champ de dilatation est également présent. Récemment, des calculs ab initio de cette dislocation vis dans différents métaux de transition réalisés au SRMP par Lucile Dezerald ont confirmé la présence de ce champ de dilatation pour tous les métaux de transition c.c., l'amplitude du volume de dilatation variant d'un métal à l'autre.

Dans le fer, nous avons obtenu le même dipôle élastique, et donc le même volume de dilatation, pour les configurations cœur facile et cœur difficile de la dislocation vis. La dilatation créée par la dislocation ne dépend donc pas vraiment de la structure atomique du cœur dans ce cas. Elle doit donc plutôt trouver son origine dans l'anharmonicité du comportement élastique du cristal. Il serait dès lors plus correct d'utiliser la théorie élastique non linéaire pour modéliser cet effet de dilatation, en suivant par exemple l'approche de Seeger et Haasen [104] reposant sur le modèle de Grüneisen d'un cristal isotrope, ou bien le schéma itératif proposé par Willis [96, 105] pour un cristal anisotrope. Une modélisation en élasticité non linéaire est cependant beaucoup plus lourde à mettre en place. L'approche que nous avons utilisée, initialement proposée par Gehlen *et al.* [90], repose sur l'élasticité linéaire et incorpore toute l'anharmonicité dans un terme source localisé au niveau de la ligne de dislocation. Notre travail, ainsi que les études précédentes [90,92,94], montre qu'il s'agit d'un compromis raisonnable permettant de correctement prendre en compte cet effet de dilatation.

Nous avons vu que ce champ de cœur pouvait conduire à des artefacts dans l'interprétation des simulations atomiques, mais il faut également s'interroger sur les conséquences physiques associées à la présence d'un tel champ. Le volume de formation de la dislocation qui en découle conduit naturellement à une augmentation du paramètre de maille avec la densité de dislocations, comme a pu le mettre en évidence expérimentalment Crussard [106]. Ce champ conduit également à une interaction de la dislocation avec une pression (Eq. 4.3) : Hirth [107] a souligné qu'on pouvait dès lors

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

s'attendre à une modification des propriétés des dislocations sous pression, comme leur tension de ligne ou les énergies de formation de double décrochements. Bien qu'il décroit plus rapidement que le champ de Volterra, il peut aussi modifier l'interaction de la dislocation avec d'autres défauts, conduisant par exemple à des modifications des propriétés dans les empilements de dislocations [101, 108] ou une modification de l'interaction de la dislocation avec les impuretés [109]. Dans le cas de la dislocation vis $1/2\langle 111\rangle$ dans le fer, nous nous sommes intéressés plus spécifiquement aux conséquences de ce champ sur la stabilité d'un dipôle de dislocations vis et l'interaction d'une dislocation vis avec un atome de carbone [103]. Ce champ tend à stabiliser le dipôle de dislocations et augmente également l'énergie de liaison du carbone à la dislocation. Néanmoins, dans les deux cas, le champ de cœur n'est pas suffisamment important pour conduire à un effet à très longue distance : dès qu'on se trouve à une distance d'environ 10 Å de la dislocation, on retrouve des propriétés pilotées uniquement par le champ de Volterra. La principale manifestation de ce champ de cœur semble donc être dans nos calculs ab initio à cause de la petite taille de nos boîtes de simulation, les artefacts correspondant pouvant être minimisés en utilisant un arrangement périodique quadripolaire.

Pour conclure, notons que l'approche développée ici pour étudier les dislocations peut être généralisée à d'autres défauts. Ainsi, Céline Varvenne a développé au cours de son post-doc une même approche couplant simulations atomiques et théorie élastique pour modéliser les défauts ponctuels [110]. Ceci permet de calculer l'énergie provenant de l'interaction élastique du défaut avec ses images périodiques, et de retrancher ensuite celle-ci de l'énergie calculée ab initio pour obtenir au final l'énergie d'un défaut ponctuel isolé. L'application de la méthode à l'étude ab initio de l'auto-interstitiel dans le zirconium des amas interstiels dans le fer et de la lacune neutre dans le silicium a montré qu'il était dès lors possible d'obtenir des énergies convergeant plus rapidement avec la taille de la boîte de simulation, rendant ainsi possible l'étude de défauts plus complexes ou la mise en œuvre de de méthodes ab initio plus coûteuse en temps de calcul que les approximations LDA ou GGA.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Chapitre 5

La dislocation vis dans le zirconium

Article associé:

Clouet E. *Screw dislocation in zirconium : An ab initio study.* Phys. Rev. B **86** (2012), p. 144104.

Tout comme les métaux de transition cubique centré, la plasticité du zirconium et du titane, métaux de transition hexagonale compacte (h.c.), est contrôlée à basse température par le glissement des dislocations vis. Celles-ci ont pour vecteur de Burgers $1/3\langle 1\bar{2}10\rangle$, vecteur correspondant à une arrête de l'hexagone basal, et glissent dans les plans prismatiques. On observe expérimentalement que ces dislocations vis glissent avec difficulté par rapport aux autres orientations dans les alliages de titane et de zirconium. On voit ainsi à basse température de longues dislocations rectilignes résidant dans leur direction vis [111–116]. En outre, la limite d'écoulement du cristal dépend fortement de la température [112, 114, 117–122], indiquant une mobilité des dislocations thermiquement activée. Cependant, les données expérimentales indiquent également que la limite d'écoulement du zirconium et du titane décroit fortement lorsque la concentration en éléments d'addition interstitiels, en particulier l'oxygène, diminue [112, 114, 117, 118, 121, 122]. Il semble donc que la faible mobilité des dislocations vis soit de nature extrinsèque, les dislocations glissant facilement dans le zirconium et le titane purs.

Les mécanismes à l'origine du durcissement associé à une addition d'oxygène ou autre impureté interstitielle demeure pour l'instant inconnus. En particulier, un tel durcissement ne trouve pas son origine dans une interaction élastique entre dislocations et impuretés [114]. Il semble plutôt que l'addition d'oxygène entraine une modification des propriétés de cœur de la dislocation vis, rendant le glissement de celle-ci plus difficile. Dans le but de mieux comprendre ce comportement plastique du zirconium et du titane,

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

en particulier l'influence de l'addition d'oxygène sur celui-ci, nous avons effectué des simulations atomiques pour étudier la dislocation vis. Une telle étude commence bien entendu par une modélisation de la dislocation dans le métal pur.

Selon Legrand [123], la facilité relative du glissement prismatique par rapport au glissement basal est contrôlé par les énergies de faute d'empilement dans ces plans et ces énergies dépendent finement de la structure électronique. En particulier, Legrand a montré avec un modèle de liaisons fortes que le glissement prismatique des métaux de transition de la colonne IV B (Ti, Zr, Hf) est dû au remplissage électronique de la bande d. Il apparait dès lors nécessaire de prendre en compte le caractère angulaire de la liaison atomique associée à l'orbitale d pour modéliser les dislocations dans ces métaux. Ceci interdit, a priori, l'emploi de potentiels empiriques simples, de type EAM ou approximation du second moment des liaisons fortes, pour une étude des dislocations. Par contre, les simulations atomiques reposant soit sur un modèle de liaisons fortes [124, 125], soit sur des calculs ab initio [113, 126–129] parviennent parfaitement à prédire un étalement de la dislocation vis $1/2\langle 1\bar{2}10\rangle$ dans les plans prismatiques, en accord donc avec le glissement prismatique observé expérimentalement. Aucune de ces études n'a estimé la contrainte de Peierls associée à ce glissement. La seule valeur calculée par simulation atomique a été obtenue par Khater et Bacon [130] avec le potentiel EAM de Mendelev [38] : dans le zirconium, la dislocation vis a une une contrainte de Peierls de 22 MPa et la coin 16 MPa. Comme indiqué précédemment, le formalisme du potentiel utilisé dans cette étude n'est pas bien adapté à la description des interactions atomiques nécessaire pour modéliser les dislocations dans le zirconium. Nous avons donc décidé d'utiliser des calculs ab initio pour étudier cette dislocation vis dans le zirconium et obtenir sa contrainte de Peierls.

Ces calculs ab initio ont été réalisés avec les codes Siesta et Pwscf. Les mêmes propriétés sont obtenues pour la dislocation vis avec ces deux codes. Néanmoins, nous n'avons pas réussi à obtenir avec Siesta la précision souhaitée pour calculer la barrière de Peierls sans être gêné par le bruit numérique. Nous ne reprenons dans ce chapitre que les résultats obtenus avec Pwscf, l'ensemble de cette étude ab initio étant décrite dans la référence 37.

5.1 Faute d'empilement

La dissociation d'une dislocation est contrôlée par l'existence d'une faute d'empilement métastable dans le plan correspondant. L'existence d'une telle faute peut être recherchée en effectuant des calculs de faute d'empilement généralisée, également appelée γ-surface, comme l'a introduit Vitek [41,131]. Ces calculs décrivent la variation d'énergie lorsqu'un cristal est coupé sui-

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

TABLE 5.1 – Énergies de faut d'empilement dans le plan de base, γ_b, et dans le plan prismatique, γ_p, calculées avec différents modèles énergétiques. R est le rapport défini par Legrand [123]. d_b^{eq} et d_p^{eq} sont les distances de dissociation d'une dislocation vis calculées en théorie élastique anisotrope à partir des énergies de faute [37].

	EAM [38]	SIESTA [37]	PWSCF [37]	VASP [132]	VASP [133]
γ_b (mJ m^{-2})	198.	199.	213.	200.	227.
γ_p (mJ m^{-2})	135. (274.) [1]	233.	211.	145.	197.
$R = C_{66}\gamma_b/C_{44}\gamma_p$	1.12	0.96	1.36	1.85	2.1
d_b^{eq} (Å)	4.0	2.0	2.7	3.4	3.2
d_p^{eq} (Å)	7.8	4.6	5.9	9.6	7.4

vant un plan donné et que les deux parties du cristal sont déplacées l'une par rapport à l'autre d'un vecteur faute appartenant au plan de coupe. Les atomes sont autorisés à relaxer seulement dans la direction perpendiculaire à ce plan.

Pour introduire une seule faute dans la boîte de simulation, tout en conservant des conditions aux limites tri-périodiques, le déplacement correspondant au vecteur faute est également ajouté au vecteur de périodicité ayant une composante perpendiculaire au plan de faute. Ceci permet de ne pas introduire de surfaces dans la boîte de simulation, surfaces qui perturbent non seulement la structure électronique mais également la relaxation élastique.

La γ-surface réalisée pour le plan de base présente un minimum en $1/3[1\bar{1}00]$. Celui-ci correspond à la faute intrinsèque I_2 qui transforme l'empilement des plans de base de la séquence BABABA à la séquence BABCAC [134]. Toutes les simulations atomiques, qu'elles reposent sur un potentiel empirique ou les calculs ab initio, prédisent ce minimum. L'énergie de faute obtenue γ_b pour ce minimum diffère peu d'un modèle énergétique à l'autre (Tab. 5.1).

La γ-surface pour le plan prismatique présente un minimum en $1/6[1\bar{2}10]$, correspondant donc à la moitié du vecteur de Burgers (Fig. 5.2). Ce minimum, prédit par l'ensemble des calculs ab initio [37, 127, 133], se trouve décalé en $a/6[1\bar{2}10] \pm \alpha c[0001]$ avec des potentiels empiriques de type EAM. En particulier, le potentiel EAM de Mendelev [38] conduit à $\alpha = 0.14$. Bacon et Vitek [135] ont remarqué que ce minimum, également prédit par un

1. Pour le calcul avec le potentiel EAM de l'énergie de faute d'empilement prismatique, la valeur entre parenthèses correspond au maximum en $a/6[1\bar{2}10]$, tandis que la valeur plus petite correspond au minimum réel en $a/6\ [1\bar{2}10] + 0.14c\ [0001]$.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

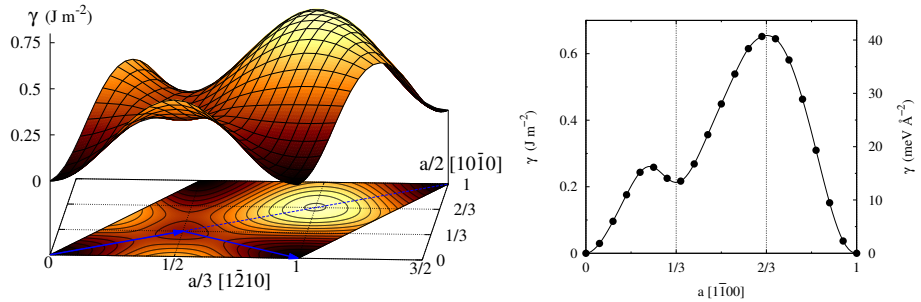


FIGURE 5.1 – Énergie de faute d'empilement généralisée dans le plan basal. Les flèches indiquent les vecteurs de Burgers des deux dislocations partielles correspondant à une dissociation dans le plan basal. La direction [1$\bar{1}$00], le long de laquelle le profil d'énergie est tracé à droite, est indiquée par une ligne pointillée.

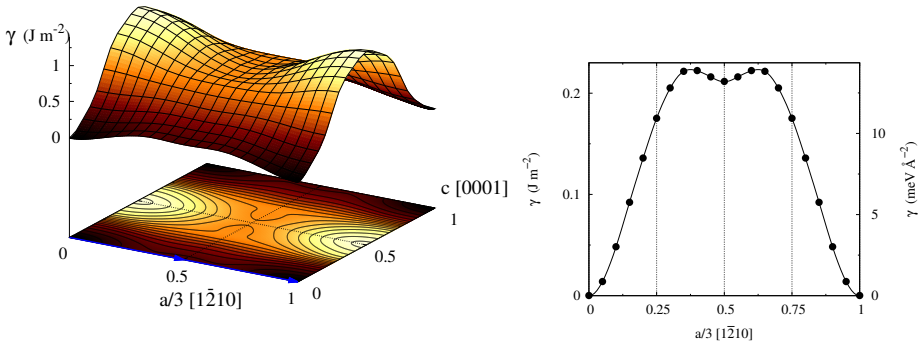


FIGURE 5.2 – Énergie de faute d'empilement généralisée dans le plan prismatique. Les flèches indiquent les vecteurs de Burgers des deux dislocations partielles correspondant à une dissociation dans le plan prismatique. Le profil d'énergie est tracé à droite le long de la direction [1$\bar{2}$10], correspondant au vecteur de Burgers.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

modèle de sphères dures [136], disparaît ou se trouve situé exactement en $1/6[1\bar{2}10]$ ($\alpha = 0$) seulement lorsqu'est pris en compte le caractère angulaire des interactions atomiques.

Selon ces calculs de faute d'empilement, deux dissociations sont possibles pour une dislocation de vecteur de Burgers $1/3[1\bar{2}10]$:

- une dissociation dans le plan basal selon le schéma $1/3[1\bar{2}10] \rightarrow 1/3[1\bar{1}00] + 1/3[0\bar{1}10]$,
- une dissociation dans la plan prismatique en deux partielles de vecteur de Burgers $1/6[1\bar{2}10]$.

Legrand [123] a proposé un critère utilisant les constantes élastiques et les énergies de faute d'empilement pour déterminer le plan dans lequel l'étalement des dislocations est le plus probable. Suivant ce critère, si le rapport $R = C_{66}\gamma_{\mathrm{b}}/C_{44}\gamma_{\mathrm{p}}$ est plus grand que 1, alors la dislocation doit s'étaler dans le plan prismatique. Le tableau 5.1 montre que c'est le cas avec nos calculs PWSCF, ainsi que l'ensemble des autres modèles énergétiques, seul le calcul SIESTA conduisant à une valeur trop proche de 1 pour pouvoir conclure.

On peut également utiliser la théorie élastique anisotrope pour calculer une distance de dissociation dans chacun de ces deux plans [37]. On prédit dans tous les cas une distance de dissociation plus importante dans le plan prismatique que dans le plan basal (Tab. 5.1).

5.2 Structure de cœur de la dislocation vis

Nos calculs ab initio montrent qu'une dislocation vis de vecteur de Burgers $1/3[1\bar{2}10]$ s'étale spontanément dans le plan prismatique, en accord donc avec les précédents calculs ab initio [113, 126, 127]. Ceci apparaît clairement sur la carte des déplacements différentiels, dite carte de Vitek [137], de la figure 5.3.

Nous avons caractérisé plus finement cet étalement en extrayant des simulations atomiques la discontinuité de déplacement dans le plan prismatique contenant la dislocation. En ajustant sur ces données un modèle de Peierls-Nabarro correspondant à deux dislocations partielles $b/2$ (*cf.* §3.3), on en déduit une distance de dissociation de 6 ± 1 Å, en accord avec la distance de dissociation prédite par la théorie élastique (Tab. 5.1). Cet ajustement nous permet également de déterminer la position de la dislocation dans le plan prismatique, cette position étant représentée par le symbole + sur la figure 5.3.

Nous avons également regardé si il était possible d'obtenir une dislocation vis dissociée dans le plan de base. Pour cela, nous construisons une dislocation initialement dissociée dans le plan de base en deux partielles de vecteurs de Burgers $1/3[1\bar{1}00]$ et $1/3[0\bar{1}10]$, puis nous relaxons les positions atomiques. En calculs ab initio, que ce soit avec SIESTA ou PWSCF, la dis-

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

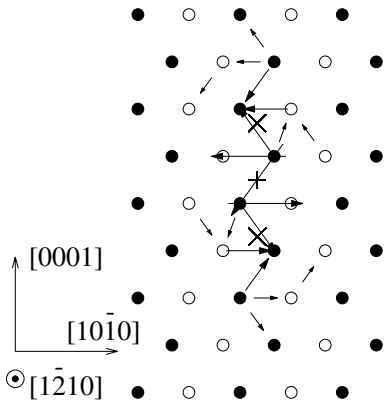


FIGURE 5.3 – Carte de déplacement différentiel [137] d'une dislocation vis $1/2[1\bar{2}10]$. Les atomes sont représentés par un rond dont la couleur dépend du plan $(1\bar{2}10)$ auquel ils appartiennent. Les flèches entre deux colonnes atomiques sont proportionnelles à la composante $[1\bar{2}10]$ de la différence de déplacement des deux atomes. Les déplacements plus petits que $0.1b$ ne sont pas représentés. Les croix $\times$ correspondent aux positions des deux dislocations partielles, et $+$ à leur centre, soit la position de la dislocation totale.

location vis se recombine pour aller se dissocier dans le plan prismatique. La dissociation basale est donc instable. Par contre, le potentiel EAM de Mendelev [38] parvient à stabiliser cette configuration dissociée dans le plan basal, son énergie étant alors plus élevée de $62\,\mathrm{meV\,\AA^{-1}}$ par rapport à la configuration dissociée dans le plan prismatique. Au vu de nos résultats ab initio, ceci semble être un artefact de ce potentiel EAM.

5.3 Potentiel de Peierls

Nous avons calculé la barrière de Peierls correspondant au glissement dans le plan prismatique de la dislocation vis. La méthode de calcul employée est la même que celle décrite au paragraphe 3.3 pour les dislocations mixtes dans le fer. Avant d'effectuer le calcul ab initio, nous avons utilisé le potentiel EAM de Mendelev [38] pour déterminer le meilleur arrangement périodique à utiliser. En effet, il est apparu que la barrière de Peierls dépendait de la taille de boîte dans le domaine accessible aux calculs ab initio. L'étude en potentiel empirique [37] montre qu'on obtient un majorant de la barrière de Peierls pour les petites tailles de boîte avec l'arrangement périodique retenu (arrangement S décrit sur la figure 2.6).

La barrière de Peierls calculée avec PWSCF est représentée sur la figure

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

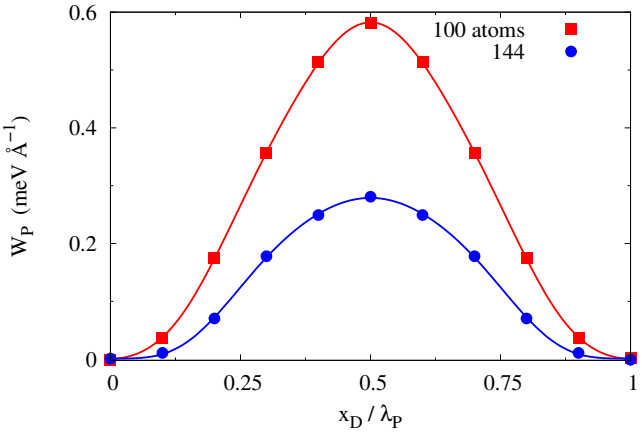


FIGURE 5.4 – Potentiel de Peierls de la dislocation vis glissant dans son plan prismatique calculée ab initio pour deux tailles de boîtes de simulation.

5.4 pour deux tailles de boîte (100 et 144 atomes). Comme prévu par le potentiel empirique, cette barrière diminue lorsque la taille de la boîte de simulation augmente. En considérant la pente maximum le long de cette barrière (Eq. 3.4), on en déduit la contrainte de Peierls $\sigma_P = 36$ MPa pour la cellule contenant 100 atomes et $\sigma_P = 21$ MPa avec 144 atomes. Nos calculs ab initio prédisent donc que la contrainte de Peierls de la dislocation vis vaut au plus 21 MPa dans le zirconium pur.

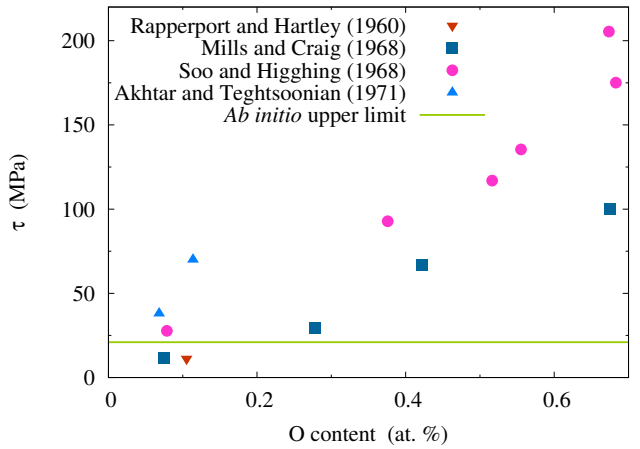


FIGURE 5.5 – Contrainte d'écoulement du zirconium déterminée expérimentalement pour différentes concentrations d'oxygène [112, 117, 118, 138]. Les données ont été extrapolées à 0 K et sont comparées à la contrainte de Peierls calculées ab initio dans le zirconium pur.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

La contrainte de Peierls de la dislocation vis ainsi estimée ab initio peut être comparée aux valeurs de la contrainte d'écoulement du zirconium déterminées expérimentalement. Ces dernières doivent être extrapolées à une composition nulle en oxygène et à une température nulle, les mesures les plus basses en température ayant été effectuées à 77 K. La comparaison effectuée sur la figure 5.5 montre qu'il y a un accord très raisonnable entre notre calcul ab initio et ces valeurs expérimentales.

5.4 Perspectives

La prochaine étape de ce travail consiste bien entendu à comprendre l'effet durcissant des impuretés interstitielles, en particulier l'oxygène, dans le zirconium. Comme mentionné en introduction, cet effet ne peut pas s'interpréter en terme d'interaction élastique entre la dislocation et le soluté [114]. Il faut plutôt envisager une modification des propriétés de cœur de la dislocation vis due à la présence d'oxygène. Les calculs ab initio doivent être en mesure d'apporter des éléments de réponse à une telle question : ceci constitue le sujet de thèse de Nermine Chaari, thèse débutée en octobre 2013. En outre, nous avons déposé un projet au programme Blanc de l'ANR (éditions 2012 et 2013), pour étudier plus en détails cette problématique du durcissement dû à l'oxygène. Ce projet, qui regroupe le SRMP et le SRMA (CEA Saclay), le CEMES (Toulouse) et le LaSIE (La Rochelle), doit utiliser non seulement des simulations atomiques mais aussi des essais de traction in situ au microscope électronique à transmission et des essais mécaniques sur monocristaux.

Le titane a un comportement plastique tout à fait similaire à celui du zirconium, ces deux métaux de transition se trouvant dans la même colonne du tableau périodique. Si des structure de cœur de la dislocation vis ont déjà été calculées ab initio dans le titane [128, 129], il n'y a pas de calcul de la contrainte de Peierls. Le travail effectué dans le zirconium et décrit dans ce chapitre est actuellement en train d'être effectué dans le titane par Alexandre Prieur (stage de fin d'études). Ceci permettra à terme d'étudier l'effet durcissant de l'oxygène également dans le titane, métal pour lequel des observations expérimentales du comportement des dislocations ont déjà été réalisées dans le métal pur avec différentes teneurs en oxygène [114,115,139].

Le système de glissement $1/3\langle 1\bar{2}10\rangle\{10\bar{1}0\}$ constitue le système principal dans le zirconium et le titane. Cependant, les dislocations avec un vecteur de Burgers $1/3\langle 1\bar{2}10\rangle$ peuvent également glisser dans des plans pyramidaux de première espèce π_1, *i.e.* $\{10\bar{1}1\}$ [140–144]. La contrainte nécessaire pour activer ce glissement est plus élevée que pour le glissement prismatique, et le glissement π_1 est principalement du glissement dévié à partir des plans prismatiques [143,144]. Expérimentalement, il est connu que l'addition d'oxygène favorise ce glissement dévié [141, 145], sans que le mécanisme derrière soit

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

connu. Dans le cadre de la thèse de Nermine Chaari, nous avons donc commencé à nous intéresser à ce glissement π_1 en effectuant des calculs ab initio de la barrière énergétique que doit franchir une dislocation vis, initialement dissociée dans le plan prismatique, pour passer dans le plan prismatique voisin en glissant dans un plan π_1. L'objectif à terme est de modéliser le glissement dévié, ainsi que l'influence de l'oxygène sur celui-ci.

Du glissement secondaire dans les plans de base est parfois reporté dans le titane et le zirconium [142, 146], ce glissement étant actif à haute température. Tout comme le glissement π_1, nous avons commencé à étudier ce glissement basal par calculs ab initio.

Tous ces systèmes de glissement impliquent des dislocations ayant pour vecteur de Burgers $1/3\langle 1\bar{2}10\rangle$. Ils ne peuvent donc pas rendre compte d'une quelconque déformation suivant l'axe [0001]. Une telle déformation ne peut avoir lieu qu'avec l'aide de dislocations de vecteur de Burgers $1/3\langle 1\bar{2}13\rangle$, dite dislocations $\langle c+a\rangle$, ou par maclage [147]. Dans le but d'avoir le panorama le plus complet possible de la plasticité du zirconium et du titane, il serait également intéressant d'étudier ces modes de déformations à l'échelle atomique.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Chapitre 5

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Chapitre 6

Interaction dislocation - défaut ponctuel

Articles associés:

- Clouet E. *The vacancy - edge dislocation interaction in fcc metals : a comparison between atomic simulations and elasticity theory.* Acta Mater. **54** (2006), p. 3543.
- Clouet E., Garruchet S., Nguyen H., Perez M. et Becquart C.S. *Dislocation interaction with C in α-Fe : a comparison between atomic simulations and elasticity theory.* Acta Mater. **56** (2008), p. 3450.
- Veiga R.G.A., Perez M., Becquart C.S., Clouet E. et Domain C. *Comparison of atomistic and elasticity approaches for carbon diffusion near line defects in α-iron.* Acta Mater. **59** (2011), p. 6963.

Nous nous intéressons à présent à l'interaction d'une dislocation avec un défaut ponctuel, que ce défaut ponctuel soit de nature intrinsèque comme une lacune ou un auto-interstitiel, ou extrinsèque comme un soluté. Cette interaction est importante pour la plasticité puisque la dislocation peut s'ancrer sur le défaut, son glissement étant ensuite contrôlé par un mécanisme d'ancrage / désancrage. Cette interaction peut également être responsable d'une ségrégation des défauts ponctuels sur la ligne de dislocation, pouvant conduire ensuite à une précipitation hétérogène. Dans le cas d'un défaut ponctuel intrinsèque, celui-ci peut en outre s'éliminer ou être créé sur la ligne de dislocation, produisant ainsi la montée de la dislocation.

Plusieurs échelles de modélisation peuvent être utilisées pour décrire cette interaction. Il est bien entendu possible d'utiliser les simulations atomiques pour prendre pleinement en compte cette interaction. Cependant, on se limitera alors à un volume de matière contenant au plus une ou deux dislocations. Cette description atomique sera justifiée lorsque la distance de séparation entre la dislocation et le défaut ponctuel est petite. Dès que cette distance

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

devient importante, l'interaction est de nature uniquement élastique si bien que la théorie élastique peut être utilisée, permettant ainsi un changement d'échelle. Dans cette perspective, nous avons comparé les prédictions de la théorie élastique avec des résultats de simulations atomiques dans le cas d'un défaut ponctuel isolé interagissant avec une dislocation rectiligne infinie. Le but est de voir à partir de quel moment la théorie élastique peut être utilisée pour modéliser cette interaction, et quels sont les éléments qui doivent être pris en compte par cette théorie pour qu'elle soit pleinement quantitative. Deux systèmes différents ont été étudiés :

- une lacune en interaction avec une dislocation coin dans un métal cubique à faces centrées (c.f.c.) [148],
- un intersitiel de carbone en interaction avec une dislocation coin ou vis dans le fer c.c. [149].

6.1 Modélisation élastique

Avant de comparer les résultats des simulations atomiques avec les prédictions de la théorie élastique, nous décrivons brièvement comment l'interaction entre une dislocation et un défaut ponctuel est décrite en théorie élastique. Le modèle élastique utilisé pour décrire le défaut ponctuel (inclusion d'Eshelby ou dipôle) est décrit plus en détails dans l'annexe D.

Cottrell et Bilby [150] ont été les premiers à utiliser la théorie élastique pour modéliser l'interaction d'un défaut ponctuel avec une dislocation. Dans leur modèle, le défaut ponctuel est un centre de dilatation (ou de contraction) caractérisé par un volume de relaxation $\delta\Omega$ interagissant avec le champ élastique créé par la dislocation. Ceci conduit à l'énergie d'interaction

$$E^{\text{inter}} = P^{\text{d}} \delta\Omega, \tag{6.1}$$

où $P^{\text{d}} = -\sum_i \sigma^{\text{d}}_{ii}/3$ est la pression créée par la dislocation au niveau du défaut ponctuel. Ce modèle correspond à ce qui est communément appelé "effet de taille". Il s'applique très bien à un atome de soluté substitutionnel ou une lacune dans un réseau de symétrie cubique, ces défauts ponctuels étant effectivement des centres de dilatation purs. Dans le cas plus général, notamment pour un interstitiel dans un réseau c.c., il faut prendre en compte le fait que l'impureté exerce sur la matrice une sollicitation ne se résumant pas uniquement à une dilatation, conduisant ainsi à une contribution supplémentaire dite "effet de forme". Cochardt a montré que l'équation 6.1 doit alors être généralisée en considérant le modèle d'inclusion d'Eshelby [98, 99], conduisant à l'énergie d'interaction (*cf.* annexe D)

$$E^{\text{inter}} = -\Omega \varepsilon^{\text{t}}_{ij} \sigma^{\text{d}}_{ij}, \tag{6.2}$$

où Ω est le volume de l'inclusion d'Eshelby utilisée pour modéliser le défaut ponctuel et ε^{t} sa déformation propre. σ^{d} est la contrainte créée par la dislocation au niveau du défaut ponctuel.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Plutôt que d'utiliser une inclusion d'Eshelby pour modéliser le défaut ponctuel, il peut être plus aisé de le représenter par une distribution de forces ponctuelles s'exerçant sur la matrice [28, 151]. En ne retenant que le terme prépondérant, le défaut ponctuel est alors uniquement caractérisé par son dipôle élastique P. Comme montré dans l'annexe D, ceci est équivalent à considérer un volume infinitésimal pour l'inclusion d'Eshelby, les deux représentations étant liées par la relation $P_{ij} = \Omega C_{ijkl} \varepsilon^{\mathrm{t}}_{kl}$, avec C_{ijkl} les constantes élastiques de la matrice. On aboutit en particulier à l'énergie d'interaction

$$E^{\mathrm{inter}} = -P_{ij} \varepsilon^{\mathrm{d}}_{ij}, \tag{6.3}$$

avec ε^{d} la déformation créée par la dislocation au niveau du défaut ponctuel ($\sigma^{\mathrm{d}}_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon^{\mathrm{d}}_{kl}$). Ce modèle de dipôle élastique utilisé pour modéliser un défaut ponctuel est bien entendu équivalent à celui utilisé dans le chapitre 4 pour modéliser le champ de cœur d'une dislocation dans le cas d'un défaut linéaire.

Le dipôle élastique P_{ij}, ou de façon équivalente le produit $\Omega \varepsilon^{\mathrm{t}}_{ij}$, modélisant un défaut ponctuel s'obtient directement par simulation atomique tel que démontré dans l'annexe D (§D.1.3).

Le défaut élastique peut également être polarisable, c'est-à-dire que ses caractéristiques dépendent du champ élastique dans lequel il est plongé [95, 152, 153]. Cela peut être pris en compte en supposant que le dipôle élastique représentatif du défaut ponctuel varie avec la déformation appliquée. Au premier ordre, on écrit

$$P_{ij}(\varepsilon) = P^0_{ij} + P^1_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \tag{6.4}$$

où P^0_{ij} est le dipôle élastique hors champ élastique appliqué, et P^1_{ijkl} est la polarisabilité du défaut. Cette polarisabilité fait apparaitre un terme du second ordre dans l'équation 6.3 donnant l'énergie d'interaction du défaut ponctuel avec un champ extérieur. [1] Cette contribution, généralement plus petite que l'effet de taille et de forme, peut néanmoins être importante à prendre en compte dans certains cas, notamment dans la modélisation du fluage sous irradiation à travers le mécanisme SIPA (Stress Induced Preferential Absorption) qui lui est associée [155], ou encore l'accélération de la montée d'une dislocation par la microstructure environnante [156]. Dans le modèle d'inclusion d'Eshelby, cette polarisabilité apparait lorsqu'est pris en compte l'effet d'inhomogénéité, c'est-à-dire le fait que l'inclusion a des constantes élastiques différentes de celles de la matrice et répond donc différemment à une sollicitation mécanique.

1. Bullough et Newman [154] notent que les contributions élastiques non linéaires du cristal conduisent également à une contribution du second ordre par rapport à la déformation appliquée. En toute rigueur, quand la contribution inhomogène est prise en compte, il faudrait également considérer ces contributions non linéaires.

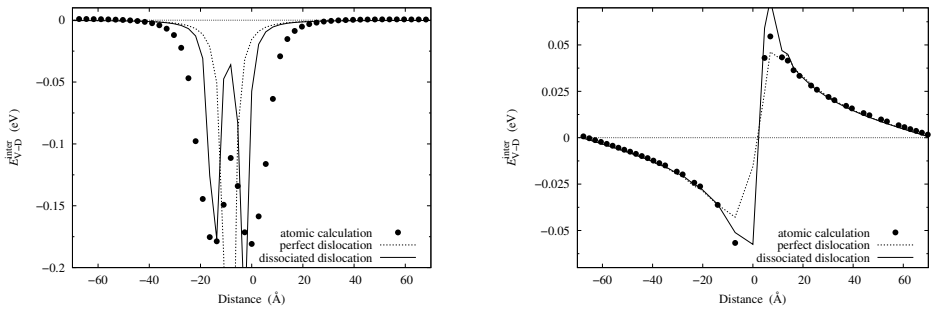
© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

La polarisabilité d'un défaut ponctuel peut s'obtenir par simulation atomique en calculant la variation des constantes élastiques d'un cristal due à la présence du défaut ponctuel [157], ou d'autres méthodes équivalentes [158]. Dans le cas d'une inclusion d'Eshelby, elle peut également s'obtenir à partir des différentes constantes élastiques de la matrice et de l'inclusion inhomogène (*cf.* annexe D).

6.2 Dislocation - lacune [148]



(a) Direction [110]. (b) Direction [$\bar{1}$11].

FIGURE 6.1 – Variation avec la distance de séparation de l'énergie d'interaction $E_{\mathrm{V-D}}^{\mathrm{inter}}$ entre la lacune et la dislocation coin suivants deux directions dans l'aluminium [148]. Les symboles correspondent aux simulations atomiques et les lignes à la théorie élastique isotrope en supposant la dislocation parfaite ou dissociée.

Nous avons calculé l'énergie d'interaction d'une dislocation coin avec une lacune dans différents métaux c.f.c. (Al, Au, Cu, Ni) en utilisant à chaque fois un potentiel empirique de type EAM [159–162]. L'énergie d'interaction est calculée pour différentes positions relatives de la lacune par rapport à la dislocation coin. Nous avons ensuite comparé les résultats de ces simulations atomiques avec les prédictions de la théorie élastique. La lacune dans un cristal c.f.c. étant un centre de dilatation, elle est uniquement caractérisée par son volume de relaxation $\delta\Omega$, et son interaction élastique avec la dislocation est décrite par l'équation 6.1. Plusieurs approximations peuvent être utilisées pour calculer la pression P^{d} créée par la dislocation intervenant dans cette équation. On peut utiliser la théorie élastique isotrope [2] ou anisotrope et supposer la dislocation parfaite ou dissociée. La comparaison des prédictions de la théorie élastique avec les résultats des simulations atomiques [148] (Fig. 6.1) nous montre, pour les quatre métaux c.f.c. considérés, que

2. Pour les calculs en théorie élastique isotrope, nous utilisons les constantes élastiques obtenues par moyenne de Voigt [4] du tenseur complet.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

- la théorie élastique parvient à prédire de façon quantitative l'interaction dislocation - lacune dès que la distance de séparation entre les deux défauts est supérieures à quelques distances atomiques ;
- la prise en compte de l'anisotropie élastique modifie très peu l'accord entre théorie élastique et simulations atomiques, même pour le cuivre qui a un comportement élastique fortement anisotrope. Étant donnée la plus grande simplicité de la théorie élastique isotrope, il n'est donc pas justifié dans ce cas de faire appel à la théorie élastique anisotrope ;
- la prise en compte de la dissociation de la dislocation, en considérant la pression créée non pas par une dislocation parfaite mais par deux dislocations partielles, améliore l'accord entre théorie élastique et simulations atomiques (Fig. 6.1) à courte distance. Nous observons une amélioration même pour Al, métal dans lequel la distance de dissociation est petite. Bien entendu, dès que la lacune se trouve suffisamment loin de la dislocation, à une distance supérieure à la distance de dissociation environ, la prise en compte de la dissociation ne modifie plus les prédictions de la théorie élastique. Patinet [163, 164] a montré que l'accord à courte distance pouvait encore être amélioré en modélisant la dissociation de la dislocation non pas à travers deux partielles séparées par un ruban de faute d'empilement, mais en utilisant le modèle de Peierls-Nabarro pour représenter le cœur et obtenir le champ élastique créé par la dislocation.

Nous avons également regardé si la prise en compte de l'effet d'inhomogénéité dû à la polarisabilité de la lacune (Eq. 6.4) modifiait l'énergie d'interaction. Pour cela, nous avons assimilé la lacune à une inhomogénéité d'Eshelby ayant des constantes élastiques nulles, maximisant ainsi cette contribution inhomogène. Une expression analytique simple de cette contribution s'obtient alors dans l'hypothèse d'un milieu élastique isotrope à partir du modèle d'inclusion d'Eshelby (Eq. D.15). Proche du cœur des dislocations partielles, l'accord entre théorie élastique et simulations atomiques est légèrement amélioré. Le principal effet de cette contribution est en fait de disymétriser l'énergie d'interaction de la lacune avec la dislocation, car cette contribution est quadratique par rapport au champ de contrainte de la dislocation, conduisant forcément à une diminution de l'énergie d'interaction.

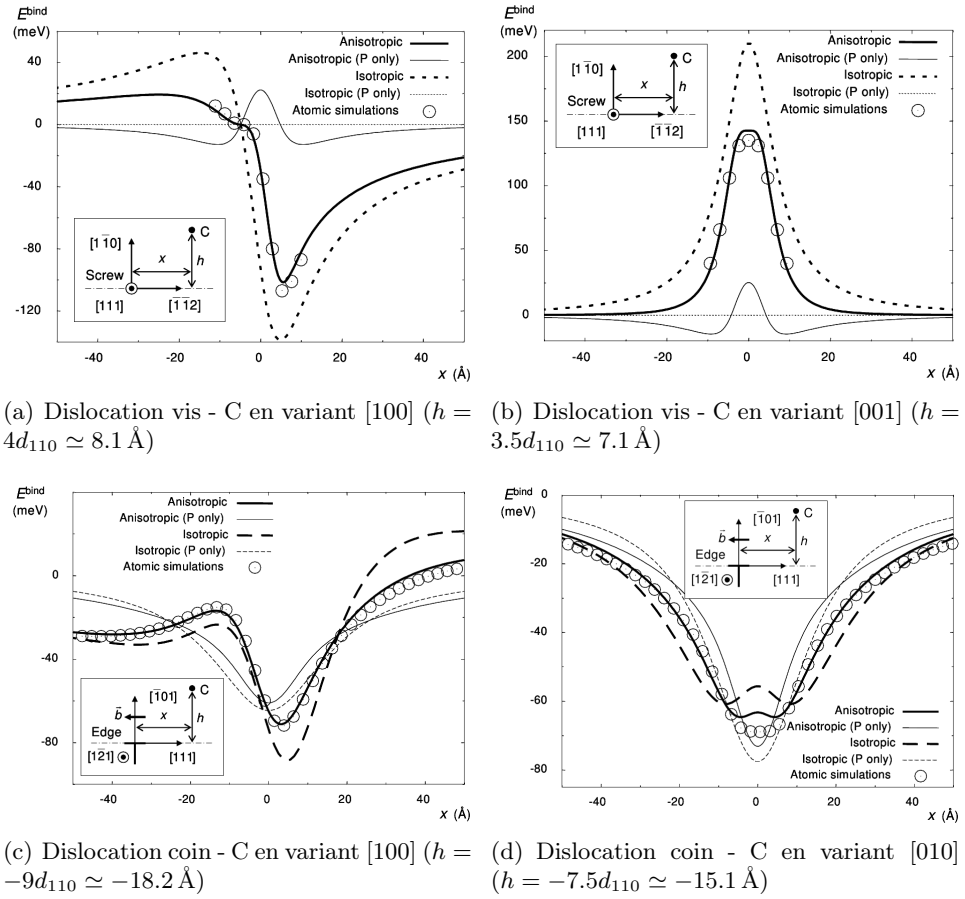
Un travail similaire réalisé par Chen *et al.* [165] dans le tungstène pour des dislocations soit coin, soit vis, aboutit également à la conclusion que la théorie élastique isotrope parvient bien à prédire l'interaction dislocation - lacune dès que les défauts sont séparés d'une distance supérieure à $\sim 5\,\text{Å}$. Dans le cas de la dislocation vis, l'effet d'inhomogénéité doit nécessairement être considéré, l'interaction élastique étant nulle sans celui-ci. Pour la dislocation coin, l'effet de taille prédomine comme dans notre étude.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

6.3 Dislocation - interstitiel [149]



(a) Dislocation vis - C en variant [100] ($h = 4d_{110} \simeq 8.1\,\text{Å}$)

(b) Dislocation vis - C en variant [001] ($h = 3.5d_{110} \simeq 7.1\,\text{Å}$)

(c) Dislocation coin - C en variant [100] ($h = -9d_{110} \simeq -18.2\,\text{Å}$)

(d) Dislocation coin - C en variant [010] ($h = -7.5d_{110} \simeq -15.1\,\text{Å}$)

FIGURE 6.2 – Énergie de liaison ($E^{\text{bind}} = -E^{\text{inter}}$) entre une dislocation, vis ou coin, et un atome de carbone en site octaédrique pour différents variants. Les symboles correspondent aux simulations atomiques et les lignes à la théorie élastique, considérant soit toutes les composantes du tenseur de la contrainte créée par la dislocation, soit uniquement la pression, et prenant en compte ou non l'anisotropie élastique.

Le même travail de comparaison entre simulations atomiques et théorie élastique a été effectué pour un interstitiel de carbone interagissant avec une dislocation coin ou vis dans le fer [149]. Cette étude s'est effectuée en collaboration avec Charlotte Becquart, dans le cadre de la thèse de Hoang Nguyen, et avec Michel Perez, dans le cadre du post-doc de Sébastien Garruchet. Pour les simulations atomiques, un potentiel empirique EAM [166] a été utilisé. Ce potentiel repose sur le potentiel EAM de Mendelev [36] pour les

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

interactions dans le fer pur. Les interstitiels de carbone résident dans les sites octaédriques de la maille c.c. du fer. Ces sites ont une symétrie tétragonale, si bien que le dipôle élastique représentant l'atome de carbone et exprimé dans le repère de la maille cubique est diagonale avec les deux composantes P_{ii} identiques dans le plan orthogonal à l'axe tétragonal. L'interaction élastique du carbone avec la dislocation est à présent décrit par l'équation 6.3.

La comparaison des prédictions de la théorie élastique avec les résultats des simulations atomiques (Fig. 6.2) nous montre que :

- la théorie élastique parvient à prédire quantitativement l'énergie interaction dès lors que l'anisotropie élastique est prise en compte, ainsi que l'ensemble des composantes du dipôle caractérisant le carbone. Pour la dislocation vis, l'accord est parfait même quand l'atome de carbone est très proche du cœur ($\sim 2\,\text{Å}$). Pour la dislocation coin, un accord parfait est obtenu à partir d'une distance de séparation d'environ $20\,\text{Å}$;
- si on suppose un comportement élastique isotrope, on ne reproduit que qualitativement cette énergie d'interaction ;
- on ne peut pas supposer que l'atome de carbone est un simple centre de dilatation, et négliger ainsi la composant tétragonale de sa sollicitation : cela conduit à une énergie d'interaction en désaccord avec les simulations atomiques.

Ce travail a ensuite été étendu par Roberto Veiga au cours de sa thèse [3] pour également prédire avec la théorie élastique les barrières de migration de l'interstitiel de carbone dans le champ de contrainte de la dislocation [22,23]. En effet, le modèle élastique (Eq. 6.3) peut être utilisé non seulement pour calculer l'énergie d'interaction avec la dislocation quand le carbone est dans sa position stable, i.e. le site octaédrique, mais également quand le carbone migre d'une position stable à la position voisine. En particulier, la barrière d'énergie associée à la migration de l'atome de carbone s'écrit

$$E^{\text{mig}}(\varepsilon^{\text{d}}) = E^{\text{mig}}(0) + P_{ij}^{\text{C,octa}}\varepsilon_{ij}^{\text{d}}(\vec{r}_{\text{octa}}) - P_{ij}^{\text{C,saddle}}\varepsilon_{ij}^{\text{d}}(\vec{r}_{\text{saddle}}),$$

où $P_{ij}^{\text{C,octa}}$ et $P_{ij}^{\text{C,saddle}}$ sont les dipôles élastiques caractérisant l'atome de carbone respectivement en position stable et au point col, $\vec{r}_{\text{octa}}$ et $\vec{r}_{\text{saddle}}$ les positions respectives, et $\varepsilon^{\text{d}}(\vec{r})$ la déformation créée par la dislocation au point $\vec{r}$.

L'effet du champ de contrainte de la dislocation sur la migration du carbone peut être visualisé en définissant, pour chaque configuration stable i du carbone, un vecteur biais

$$\langle\vec{d}\rangle = \sum_j P_{i\to j}\vec{\delta}_{i\to j}, \tag{6.5}$$

3. Thèse encadrée par Michel Perez et Charlotte Becquart.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

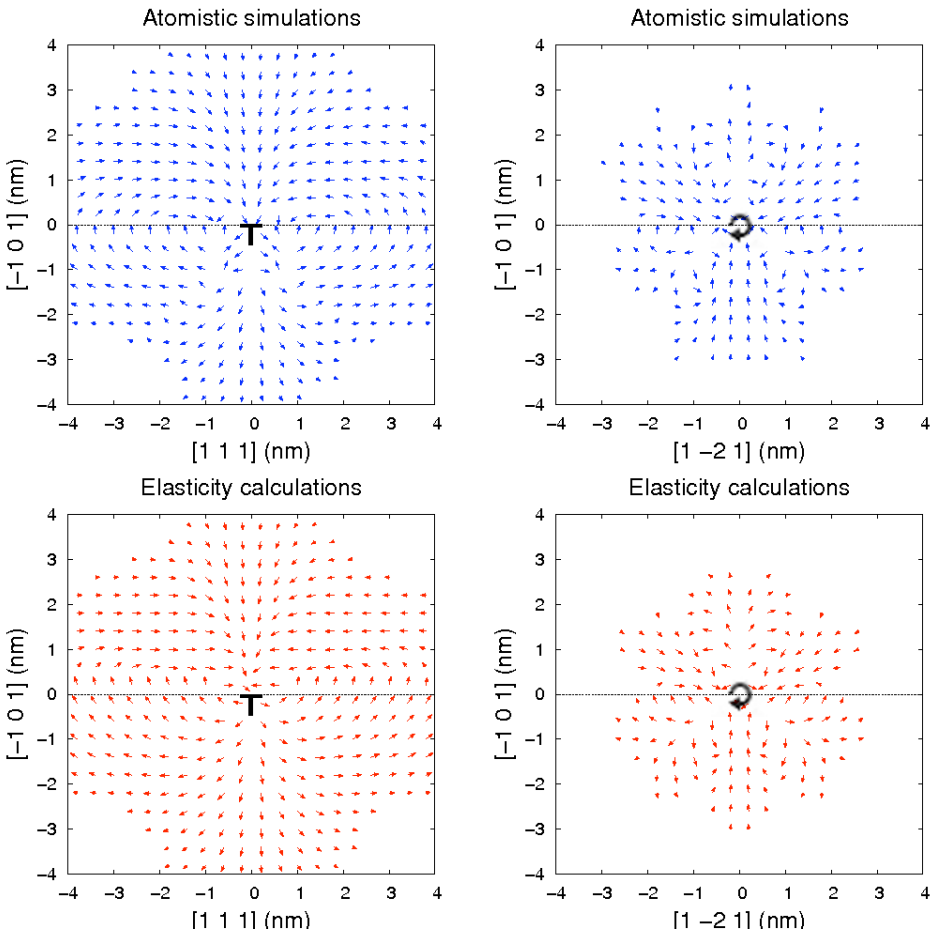


FIGURE 6.3 – Biais $\langle \vec{d} \rangle$ introduit par la dislocation sur la migration d'un interstitiel de carbone dans le fer à 300 K (Eq. 6.5) calculé soit par simulations atomiques, soit en théorie élastique anisotrope. La dislocation est de type coin à gauche, et vis à droite.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

où $P_{i\to j}$ est la probabilité pour l'atome de carbone de passer de la configuration i à j, et $\vec{\delta}_{i\to j}$ le vecteur joignant ces deux configurations. En calculant ces probabilités $P_{i\to j}$ soit par simulations atomiques, soit en théorie élastique anisotrope, on peut comparer les prédictions des deux méthodes de modélisation (Fig. 6.3). On voit ainsi que la théorie élastique permet pleinement de prendre en compte l'effet du champ de contrainte de la dislocation sur la migration du carbone. Une modélisation à l'échelle atomique ne s'avère nécessaire que proche du cœur de la dislocation.

Le même type de méthode reposant sur la représentation d'un défaut ponctuel par un dipôle élastique a été utilisé par Subramanian *et al.* [167] pour modéliser la migration d'une lacune dans le champ de contrainte d'une dislocation dans le zirconium.

6.4 Conclusion et perspectives

Ce travail de comparaison entre simulations atomiques et théorie élastique montre l'aptitude de cette dernière à décrire de façon quantitative l'interaction d'un défaut ponctuel avec une dislocation, que ce défaut ponctuel soit de nature lacunaire ou interstitiel. Une description atomique s'avère nécessaire seulement quand le défaut ponctuel est proche du cœur de la dislocation. Dès lors, il est possible de coupler les deux échelles de modélisation en limitant la région où une description atomistique est employée au voisinage immédiat du cœur des dislocations. Comme le montre le travail de Roberto Veiga [22, 23], ceci peut être fait non seulement pour modéliser l'interaction des deux défauts, mais également la cinétique d'évolution. Il est alors possible de s'intéresser à des situations plus complexes que les "cas d'école" traités dans ce chapitre. À titre d'illustration, on peut citer les travaux de Chen *et al.* [168] utilisant une telle modélisation élastique pour simuler la cinétique de ségrégation de soluté sur une jonction de dislocation puis l'évolution en fonction du temps de la contrainte de destruction de la dislocation.

Notre étude montre également que l'interaction élastique de la lacune avec une dislocation se limite au simple "effet de taille", conduisant à une expression simple de l'énergie d'interaction ne faisant intervenir que le champ de pression. Par contre, ceci n'est plus forcément vrai pour l'interstitiel à cause de la symétrie de celui-ci pouvant entraîner un "effet de forme". [4] Les théories continues de la diffusion des défauts ponctuels vers les dislocations, utilisées en particulier pour obtenir des lois exprimant la vitesse de montée des dislocations, ne considèrent que l'effet de taille [154–156, 169]. Ceci est donc pleinement justifié pour la lacune, mais demanderait à être validé dans le cas de l'interstitiel.

4. Cet effet de forme est présent pour un cristal c.c. mais pas forcément pour un cristal c.f.c. où l'interstitiel est généralement un simple centre de dilatation.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Chapitre 6

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Chapitre 7

Absorption de lacunes par les dislocations

Article associé:

Clouet E. *Predicting dislocation climb : Classical modeling versus atomistic simulations*. Phys. Rev. B **84** (2011), p. 092106.

À haute température ou sous irradiation, les dislocations peuvent bouger hors de leur plan de glissement. Ce mouvement, appelé montée, nécessite l'émission ou/et l'absorption de défauts ponctuels. Dans les métaux hors irradiation, ces défauts ponctuels sont des lacunes, car les auto-intersitiels ont une énergie de formation beaucoup trop élevée pour pouvoir être émis. La modélisation de la montée des dislocations nécessite de comprendre le mécanisme d'absorption et création de lacunes par la dislocation. Cette absorption ou émission ne s'effectue pas n'importe où sur la ligne de dislocation, mais en des endroits localisés nommés crans. Nous nous sommes donc intéressés à la structure de ces crans, ainsi qu'à leur interaction avec les lacunes en nous appuyant sur des simulations atomiques. Le but est de comprendre quels ingrédients doivent être retenus pour pouvoir ensuite modéliser la montée à une échelle supérieure, typiquement l'échelle mésoscopique des simulations de dynamique des dislocations. Dans cette même perspective, nous nous intéressons à la cinétique de diffusion des lacunes vers une dislocation crantée, comparant vitesses de montée observée en simulations atomiques avec les vitesses prédites par les modèles classiques de montée.

7.1 Dislocation crantée

Classiquement, un cran se définit comme une portion de la ligne de dislocation perpendiculaire à son plan de glissement. Cependant, dès que l'on s'intéresse à une structure particulière, la cristallographie de celle-ci a des

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

conséquences sur la structure du cran. Dans les métaux cubiques à faces centrées (c.f.c.), Hirsch [170] a décrit les différentes configurations possibles pour un cran en se basant sur des modèles de tension de ligne et les règles classiques de dissociation des dislocations. Selon Hirsch, un cran peut se former soit dans un plan dense (111) (faces du tétraèdre de Thompson [171]), soit dans une direction dense [110] (arêtes du tétraèdre de Thompson). Dans les deux cas, la direction du cran n'est pas perpendiculaire au plan de glissement de la dislocation et il existe donc une configuration obtuse et une configuration aiguë.

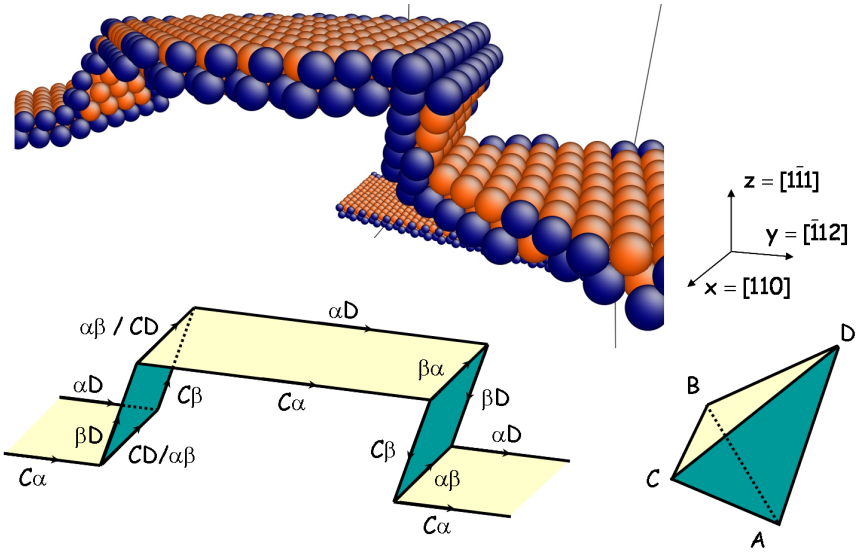


FIGURE 7.1 – Structure atomique d'une dislocation coin crantée dans le cuivre. La hauteur du cran correspond à 5 plans (111) et sa configuration est obtuse à gauche et aiguë à droite. Seuls les atomes ne présentant pas un empilement c.f.c. sont représentés : les atomes en bleu foncé appartiennent au cœur des dislocations partielles et les atomes en orange au défaut d'empilement. Les règles de dissociation de la dislocation coin dans les plans (111) α et β telles que prédites par Hirsch [170], ainsi que le tétraèdre de Thompson correspondant, sont représentés sur le schéma du bas.

Nous avons étudié la structure des crans sur une dislocation coin par simulations atomiques en utilisant divers potentiels EAM représentatifs des métaux c.f.c. [159–162]. Afin de vérifier si la description donnée par Hirsch [170] correspond réellement à ce qui est observé à l'échelle atomique, nous nous intéressons tout d'abord à des crans dont la hauteur correspond à plusieurs plans (111) (jusqu'à 5 plans). Quels que soient la hauteur du cran et le métal c.f.c. considéré, la structure la moins énergétique est obtenue pour un cran résidant dans un plan dense de type (111) partageant le même

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

vecteur de Burgers que le plan de glissement de la dislocation (Fig. 7.1). Ceci est vrai aussi bien pour un cran obtus qu'aigu. Ces deux types de cran sont dissociés et cette dissociation correspond à la description donnée par Hirsch [170]. En particulier, à l'intersection des deux plans denses, correspondant au plan de glissement de la dislocation et au plan de dissociation du cran, apparaissent des dislocations *stair rod*. Celles-ci sont des dislocations de Hirth (type $CD/\alpha\beta$) dans le cas d'un cran obtus et des dislocations de Lomer-Cottrell (type $\alpha\beta$) dans le cas d'un cran aigu. La longueur de dissociation différente observée en chacune des extrémités du cran peut se rationaliser en considérant les normes différentes des vecteurs de Burgers de ces dislocations *stair rod* entrainant donc des tensions de ligne différentes, ainsi que par le fait que chaque partielle composant la dislocation coin tend à prendre à un nœud tripe une orientation vis afin de minimiser sa tension de ligne [172, 173].

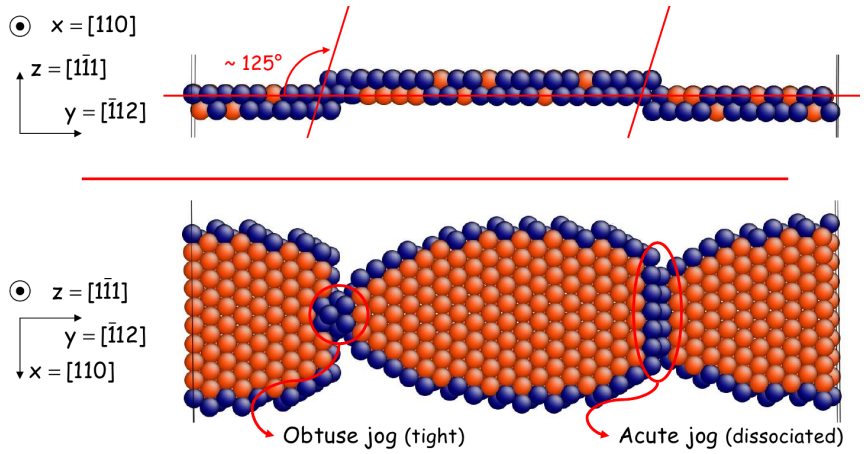


FIGURE 7.2 – Structure atomique d'une dislocation coin crantée dans le cuivre pour une hauteur de cran correspondant à un plan dense (111). Seuls les atomes ne présentant pas un empilement c.f.c. sont représentés : les atomes en bleu foncé appartiennent au cœur des dislocations partielles et les atomes en orange au défaut d'empilement.

Les double-crans de hauteurs monoatomiques ont une structure rémanente des "super-crans" (Fig. 7.2). On retrouve en particulier le fait que le cran aigu s'étale moins que le cran obtus, en accord avec la description précédente en terme de dislocations *stair rod*. Le tableau 7.1 montre que les énergies de formation de ces double-crans varient d'un facteur 5 d'un métal c.f.c. à l'autre. Ces variations peuvent se rationaliser en considérant l'énergie élastique des dislocations *stair rod*. Comme il s'agit de dislocations purement coin, leur énergie élastique varie, d'un métal à l'autre, comme

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Potentiel	Al [159]	Au [160]	Cu [161]	Ni [162]
$E^{\mathrm{f}}_{\mathrm{jog}}$ (eV)	1.2	3.5	4.7	5.0
a (Å)	4.032	4.079	3.615	3.52
γ (mJ.m^{-2})	104	30.7	44	89
C_{11} (GPa)	118	185.8	170	246
C_{12} (GPa)	62.3	157.1	123	147
C_{44} (GPa)	36.7	38.9	76.2	125
μ (GPa)	33.2	29.1	55.2	94.7
ν	0.320	0.418	0.324	0.277
d (Å)	11.7	43.4	37.0	27.5
$E^{\mathrm{f}}_{\mathrm{jog}} / \left[\mu^2 a^4 (2+\nu)/\gamma(1-\nu)^2\right]$	0.14	0.10	0.13	0.12

TABLE 7.1 – Énergie de formation d'un double décrochements $E^{\mathrm{f}}_{\mathrm{jog}}$ dans différents métaux c.f.c. Sont également donnés le paramètre de maille a, l'énergie de faute d'empilement γ, les constantes élastiques anisotropes C_{11}, C_{12}, et C_{44}, le module de cisaillement μ et le coefficient de Poisson ν obtenus par moyenne de Voigt, et la distance de dissociation d calculée en théorie élastique isotrope.

$\mu\ a^2/(1-\nu)$, avec μ le module de cisaillement, ν le coefficient de Poisson et a le paramètre de maille. Ces segments de dislocation ont une longueur de l'ordre de la distance de dissociation d de la dislocation coin. Selon la théorie élastique isotrope, cette distance de dissociation est donnée par $d = \left[(2+\nu)\mu a^2\right] / \left[(1-\nu)48\pi\gamma\right]$, avec γ l'énergie de faute d'empilement. Au final, on prédit donc que l'énergie de formation d'un double cran doit varier comme

$$E^{\mathrm{f}}_{\mathrm{jog}} \propto \frac{\mu^2 a^4}{\gamma} \frac{2+\nu}{(1-\nu)^2},$$

ce que confirme le tableau 7.1 avec un facteur de proportionnalité valant 0.12 ± 0.02.

Les simulations de dynamique moléculaire réalisés dans le cuivre montrent que ces dislocations crantées peuvent glisser sans émission de défaut ponctuel. Le cran a juste pour effet d'augmenter la force de friction s'exerçant sur la dislocation. Ceci est vrai même pour des super-crans, malgré la présence des petits segments de dislocation *stair rod*. Le même comportement dynamique d'une dislocation coin crantée a été observé par Rodney et Martin dans le nickel [172].

Le calcul par simulation atomique de l'énergie d'interaction de la dislocation coin crantée avec une lacune montre que la position la plus attractive pour la lacune se situe dans le cœur d'une dislocation *stair rod*. Dans le cas où la hauteur du cran correspond à un seul plan (111), l'énergie d'interaction ainsi obtenue vaut exactement l'opposé de l'énergie de formation de la lacune en volume. Ceci traduit le fait que ces crans mono-atomiques constituent des

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

sources et des puits parfaits de lacunes. La meilleure façon de s'en convaincre est d'observer la structure du cran après avoir disposé une lacune au niveau de la dislocation *stair rod* et laissé le système se relaxer. Bien que le cran soit dissocié, il parvient parfaitement à absorber la lacune, avançant ainsi d'une distance interatomique et conduisant donc à la montée de la dislocation. Ce scénario est vérifié pour les configurations obtuse et aiguë du cran.

7.2 Vitesse de montée des dislocations

Modéliser la montée des dislocations nécessite d'exprimer leur vitesse de montée par une loi de mobilité. Ceci peut être fait en s'appuyant sur la théorie de la diffusion afin de décrire la cinétique de diffusion des lacunes qui, soit viennent s'éliminer sur un cran d'une dislocation, soit y sont émises. La loi de mobilité ainsi obtenue peut ensuite être utilisée dans des modélisations à des échelles supérieures, comme des simulations de dynamique des dislocations [174–176] ou de plasticité cristalline [177]. Dans cette section, nous décrivons dans un premier temps la loi de mobilité pour la montée utilisée par Dan Mordehai et Botond Bakó au cours de leurs post-docs, puis nous validons ce modèle dans le cas particulier d'une forte sursaturation en lacunes en utilisant les résultats de simulations atomiques publiés par Kabir *et al.* [178].

7.2.1 Loi de mobilité en montée

Nous nous intéressons à la montée hors irradiation d'une dislocation rectiligne de caractère [1] θ. La montée de la dislocation s'effectue donc par émission ou absorption de lacunes. Les crans sur la lignes de dislocation étant des sources et des puits parfaits de lacunes, proches de ces crans la concentration de lacunes est à l'équilibre. Elle est donc donnée par [4, 179, 180]

$$C_{\mathrm{V}}^{\mathrm{eq}} = C_{\mathrm{V}}^{0} \exp\left(\frac{F_{\mathrm{cl}}\Omega}{kTb\sin(\theta)}\right), \tag{7.1}$$

avec $C_{\mathrm{V}}^{0} = \exp\left(-E_{\mathrm{V}}^{\mathrm{f}}/kT\right)$ la concentration de lacunes à l'équilibre dans le cristal parfait, [2] $E_{\mathrm{V}}^{\mathrm{f}}$ étant l'énergie de formation de la lacune. Le terme exponentiel dans l'équation 7.1 rend compte du travail de la force de montée F_{cl}, celle-ci étant la projection de la force de Peach-Koehler dans la direction normale au plan de glissement. Si la dislocation est soumise à une contrainte σ,

$$F_{\mathrm{cl}} = \left[(\sigma\vec{b}) \times \vec{l}\right] \cdot \vec{n}, \quad \text{avec} \quad \vec{n} = \frac{\vec{b}\times\vec{l}}{b\sin(\theta)} = \frac{\vec{b}\times\vec{l}}{\|\vec{b}\times\vec{l}\|}. \tag{7.2}$$

1. Le caractère θ est ici défini par $\sin(\theta) = \|\vec{b}\times\vec{l}\|/b$ pour une dislocation de vecteur de Burgers $\vec{b}$ et de vecteur ligne $\vec{l}$. Avec cette définition, on a toujours $\sin(\theta) \geq 0$. $\theta = \pi/2$ pour une dislocation coin et $\theta = 0$ pour une vis

2. Sous pression, il faut corriger la concentration d'équilibre de lacunes en prenant également en compte la contribution provenant du volume de relaxation [181, 182].

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Une loi de mobilité simple peut être obtenue en supposant que les crans sont suffisamment nombreux et la diffusion le long de la dislocation (*pipe diffusion*) suffisamment rapide pour que la concentration de lacunes soit à l'équilibre non seulement au niveau des crans mais également tout le long de la ligne de dislocation. En supposant que loin de la dislocation, à une distance R_∞, la concentration de lacunes est fixée à la valeur C_V^∞, la théorie de la diffusion prédit alors que la vitesse de montée d'une dislocation rectiligne infinie est donnée par [4, 174, 175, 179]

$$v_\mathrm{cl} = \eta \frac{D_\mathrm{V}}{b \sin(\theta) \ln\left(R_\infty / r_\mathrm{c}\right)} \left(C_\mathrm{V}^\mathrm{eq} - C_\mathrm{V}^\infty \right). \tag{7.3}$$

Le facteur géométrique η vaut théoriquement 2π. D_V est le coefficient de diffusion des lacunes. Le rayon de capture r_c correspond à la distance de la ligne de dislocation à laquelle la concentration de lacunes prend sa valeur d'équilibre : r_c est de l'ordre de quelques b. Cette loi de mobilité s'obtient facilement en négligeant l'interaction élastique entre lacunes et dislocations. Cependant, on montre que l'interaction élastique a pour effet principal de modifier la valeur de ce rayon de capture [156, 183]. En particulier, ce rayon de capture sera plus grand pour les auto-interstitiels que pour les lacunes, l'interaction élastique étant plus importante dans le premier cas.

Il peut s'avérer utile d'identifier dans la loi donnant la vitesse de montée de la dislocation (Eq. 7.3) les termes correspondant aux forces thermodynamiques. Ceci est nécessaire par exemple si l'on souhaite connaitre la puissance dissipée au cours du mouvement de montée. La force correspondant au travail de la contrainte appliquée sur la dislocation est bien identifiée : il s'agit de la force de Peach-Koehler, seule la composante projetée suivant la normale au plan de glissement (Eq. 7.2) intervenant au cours de la montée. Une concentration de lacunes C_V^∞ qui n'est pas à l'équilibre crée également une force sur la dislocation appelée force osmotique. L'expression de cette force s'obtient en considérant que le travail dissipé au cours de la montée est égal au nombre de lacunes absorbées ou émises multiplié par le potentiel chimique des lacunes. Lothe et Hirth [182] montrent alors que cette force osmotique est donnée par

$$F_\mathrm{os} = -\frac{b \sin(\theta) kT}{\Omega} \ln\left(\frac{C_\mathrm{V}^\infty}{C_\mathrm{V}^0}\right). \tag{7.4}$$

La loi de mobilité en montée peut donc être réécrite sous la forme

$$v_\mathrm{cl} = \eta \frac{D_\mathrm{V} C_\mathrm{V}^0}{b \sin(\theta) \ln\left(R_\infty / r_\mathrm{c}\right)} \left[\exp\left(\frac{F_\mathrm{cl}\Omega}{b \sin(\theta) kT}\right) - \exp\left(-\frac{F_\mathrm{os}\Omega}{b \sin(\theta) kT}\right) \right].$$

On voit donc que cette loi de mobilité est non linéaire. La partie correspondant à la force de Peach-Koehler peut généralement être linéarisé car pour les contraintes usuelles l'argument de l'exponentiel est petit. Par contre, il n'en est pas de même pour la partie correspondant à la force osmotique dès qu'il y a une sursaturation ou sous-saturation en lacunes.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

7.2.2 Validation à l'échelle atomique

Cette description classique de la montée permet d'expliquer raisonnablement différentes observations expérimentales. Cependant, une validation quantitative par comparaison directe de la loi de mobilité (Eq. 7.3) avec des données expérimentales n'est pas envisageable. La montée est rarement le seul mécanisme produisant de la déformation plastique, et les microstructures expérimentales de dislocations sont en général beaucoup plus complexes qu'il n'est supposé dans le modèle de diffusion. Il est possible par contre d'étudier par simulations atomiques la montée pure d'une microstructure idéale de dislocations. De telles simulations offrent donc une opportunité pour tester quantitativement les prédictions de ce modèle classique de montée.

Nous avons effectué ce travail de comparaison [184] en utilisant les simulations atomiques publiées par Kabir *et al.* [178]. Ces simulations atomiques de la montée d'une dislocation mixte dans le fer-α reposent sur un algorithme de Monte Carlo cinétique reproduisant la diffusion de lacunes et leur annihilation sur un cran de la dislocation. L'influence des dislocations sur l'énergie de migration de la lacune est pleinement prise en compte grâce à un potentiel empirique permettant ainsi de calculer les barrières de migration entre les différentes positions d'équilibre de la lacune (méthode NEB).

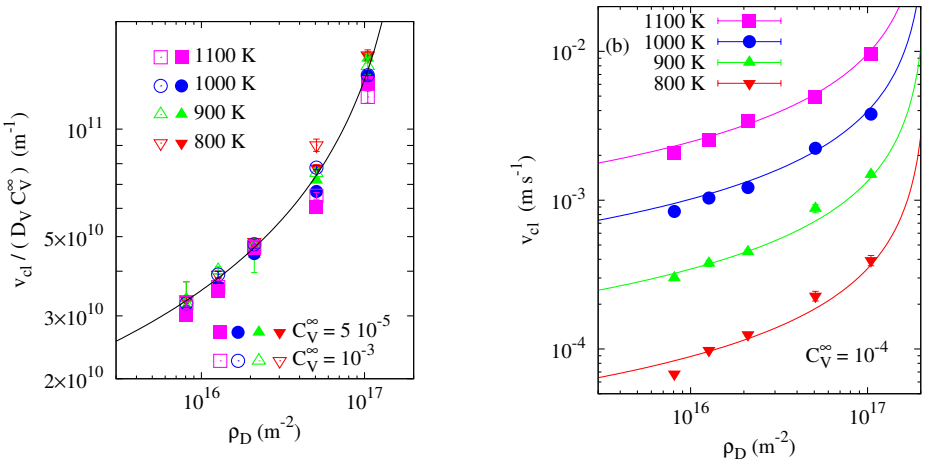


FIGURE 7.3 – Variation avec la densité de dislocation ρ_D de la vitesse de montée v_{cl} pour différentes températures et sursaturations de lacunes. Les symboles correspondent aux simulations atomiques de Kabir *et al.* [178] et les lignes à l'équation 7.5. À gauche, la vitesse de montée v_{cl} a été normalisée par la concentration de lacunes et le coefficient de diffusion.

Dans ces simulations atomiques, la montée est provoquée par une sursa-

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

turation de lacunes et, du fait de la petite taille de la cellule de simulation, les dislocations sont saturées en crans. On vérifie donc l'hypothèse utilisée pour obtenir la loi de montée donnée par l'équation 7.3. La distance R_∞ apparaissant dans cette expression doit correspondre à la moitié de la distance moyenne entre dislocation, soit $R_\infty = 1/(2\sqrt{\rho_\mathrm{D}})$, si ρ_D est la densité de dislocations. La forte sursaturation de lacunes utilisée pour ces simulations atomiques conduit par ailleurs à $C_\mathrm{V}^\infty \gg C_\mathrm{V}^\mathrm{eq}$. La vitesse de montée des dislocations dans ces simulations atomiques doit donc suivre la relation

$$v_\mathrm{cl} = -\eta \frac{D_\mathrm{V}}{b \sin(\theta) \ln(2 r_\mathrm{c} \sqrt{\rho_\mathrm{D}})} C_\mathrm{V}^\infty . \tag{7.5}$$

Cette équation prédit donc que la vitesse de montée, une fois normalisée par $D_\mathrm{V} C_\mathrm{V}^\infty$, dépend uniquement de la densité de dislocations ρ_D. Ceci est en accord avec les résultats des simulations atomiques : quels que soient la température ou la sursaturation de lacunes, la vitesse de montée est bien reproduite par l'équation 7.5 (Fig. 7.3). Le paramètre géométrique η et le rayon de capture r_c apparaissant dans cette équation ont été ajustés, le meilleur accord avec les simulations atomiques étant obtenu pour $\eta = 12.8 \sim 4\pi$ et $r_\mathrm{c} = 4.3b$. Ces deux paramètres ont donc des valeurs proches de leurs valeurs théoriques et ne dépendent ni de la densité de dislocation, ni de la sursaturation de lacunes, ni de la température.

Cette comparaison avec les simulations atomiques illustre donc la capacité du modèle classique à décrire quantitativement la montée des dislocations. La prise en compte de tous les détails à l'échelle atomique de la migration des lacunes ne semble donc pas nécessaire, si bien qu'il est possible d'utiliser une approche mésoscopique reposant sur une description de milieu continu pour modéliser la montée. Une telle approche permet non seulement de rationaliser les résultats des simulations atomiques, mais est également nécessaire pour extrapoler ceux-ci dans des domaines de densité de dislocations correspondant aux densités mesurées expérimentalement [184]. Ceci nous donne par ailleurs confiance dans l'utilisation d'un tel modèle de montée dans des simulations de dynamique des dislocations, comme nous le ferons au chapitre suivant.

7.3 Conclusions et perspectives

Après avoir étudié la structure des crans sur une dislocation dissociée dans un métal c.f.c., nous avons montré que ces crans constituent des sources et des puits parfaits de lacunes. Dès lors, une loi de mobilité décrivant la montée des dislocations peut être facilement obtenue en supposant que les dislocations sont saturées en crans, permettant ainsi de maintenir à l'équilibre la concentration de lacune au voisinage immédiat de la dislocation. La comparaison avec des simulations atomiques a permis de montrer que cette

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

loi de mobilité était pleinement quantitative. Son utilisation dans des simulations de dynamique des dislocations nous permettra au chapitre suivant d'effectuer un changement d'échelles dans notre modélisation de la montée.

Auparavant, il apparait intéressant de voir quelles sont les limites éventuelles du modèle de montée ainsi établi. L'expression de la vitesse de montée d'une dislocation (Eq. 7.3) diverge lorsque le caractère θ de la dislocation tend vers 0, c'est-à-dire pour des orientations proches de la vis. Ce modèle ne permet donc pas de décrire la montée de dislocations mixtes à fortes composantes vis. Il s'agit d'une divergence de la mobilité, la force de montée F_{cl} (Eq. 7.2) restant finie et la force osmotique F_{os} (Eq. 7.4) s'annulant pour une orientation vis. Cette divergence est due à notre hypothèse de crans suffisamment nombreux et de diffusion le long de la dislocation suffisamment rapide pour maintenir la concentration de lacune à l'équilibre. Pour une orientation vis, il n'est plus possible de définir un cran, du moins pas au sens de source / puits de lacunes, si bien que cette hypothèse de dislocation saturée en cran n'est plus valide. Pour aller au-delà de ce simple modèle de montée, il s'avère donc nécessaire de traiter plus explicitement l'influence des crans sur la montée de dislocations et également d'être capable de décrire comment la population de crans varie avec le caractère de la dislocation [185, 186]. Ceci nécessite d'aller au-delà de l'étude préliminaire que nous avons effectuée à l'échelle atomique sur les crans et d'étudier la germination de ceux-ci pour différentes orientations de la ligne de dislocation. Au final, on devrait ainsi être en mesure d'obtenir une loi de mobilité en montée s'appliquant à toutes les dislocations, quel que soit leur caractère.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Chapitre 7

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Chapitre 8

Simulations de dynamique des dislocations avec montée

Articles associés:

- Mordehai D., Clouet E., Fivel M. et Verdier M. *Introducing dislocation climb by bulk diffusion in discrete dislocation dynamics*. Philos. Mag. **88** (2008), p. 899.
- Mordehai D., Clouet E., Fivel M. et Verdier M. *Annealing of dislocation loops in dislocation dynamics simulations*. IOP Conf. Series : Mater. Sci. Eng. **3** (2009), p. 012001.
- Bakó B., Clouet E., Dupuy L.M. et Blétry M. *Dislocation dynamics simulations with climb : Kinetics of dislocation loop coarsening controlled by bulk diffusion*. Philos. Mag. **91** (2011), p. 3173.

Les simulations de dynamique des dislocations (DD) constituent un des principaux outils numériques permettant de modéliser le comportement collectif d'une population de dislocations sous un chargement mécanique quelconque. Ces simulations permettent ainsi d'effectuer un changement d'échelle, de la dislocation isolée au volume élémentaires représentatif. Pour ce faire, elles prennent en compte l'interaction élastique entre dislocations et utilisent des règles constitutives permettant une description à l'échelle mésoscopique des propriétés de cœur des dislocations telles que leur mobilité ou le glissement dévié. Pour des raisons de simplicité, les simulations de DD ne considèrent généralement que le mouvement par glissement des dislocations. Néanmoins, à haute température ou sous irradiation, celles-ci peuvent bouger hors de leur plan de glissement par montée. Ce mouvement thermiquement activé joue un rôle important pour les phénomènes de fluage [187, 188] et de restauration [189]. La montée des dislocations est en particulier essentielle pour comprendre la formation des sous-joints de polygonisation observés à haute température [190, 191], ainsi que la destruction des dipôles de disloca-

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

tions coin, permettant ainsi la restauration de la microstructure. Il apparait donc important de prendre en compte la montée des dislocations dans des simulations de DD pour pouvoir utiliser de telles simulations dans des études du comportement mécanique à chaud.

8.1 Montée par diffusion en volume

L'incorporation d'un modèle de montée dans des simulations de DD a constitué le sujet des post-docs de Dan Mordehai et Botond Bakó. Le modèle de montée implémenté est celui décrit au précédent chapitre (Eq. 7.3), dans l'hypothèse donc de dislocations saturées en crans conduisant à une vitesse de montée contrôlée par la diffusion en volume des défauts ponctuels. Dan Mordehai, en collaboration avec Marc Fivel et Marc Verdier, a implémenté ce modèle de montée [174] dans le code DD TriDis [192] développé au SIMaP (INP Grenoble), code où les lignes de dislocations sont discrétisées en segments vis et coins. Botond Bakó, en collaboration avec Laurent Dupuy et Marc Blétry, a implémenté ce même modèle de montée [175] dans le code de DD nodal aNuMoDis développé au SRMA (CEA Saclay) et au SIMaP.

Auparavant, la montée des dislocations avait été introduite dans différents codes de DD, soit à deux [190, 191, 193] ou trois dimensions [194–197]. Cependant, ces simulations traitaient généralement la montée de la même façon que le glissement des dislocations, c'est-à-dire un mouvement conservatif. Ceci ne permet pas de saisir l'ensemble de la physique, en particulier lorsque la concentration de défauts ponctuels dans le milieu n'est pas à l'équilibre et qu'il existe une force osmotique (Eq. 7.4). Le modèle de montée que nous avons utilisé avec Dan Mordehai et Botond Bakó repose sur la théorie de la diffusion des défauts ponctuels et permet donc d'aller au-delà de ces limitations.

Les simulations de DD réalisées [174] ont montré que ce modèle simple de montée permet de correctement reproduire l'activation d'une source de Bardeen-Herring, i.e. l'équivalent d'une source de Frank-Read pour le mouvement de montée, que la source soit activée par une contrainte ou par une sursaturation de lacunes. De même, l'expansion ou la décroissance de boucles prismatiques, qu'elles soient de nature interstitielle ou lacunaire, sont correctement reproduites. Dans les différents cas, la comparaison avec des formules analytiques reposant sur un modèle de tension de ligne montre qu'il n'y a pas d'artefact introduit par la discrétisation des simulations de DD.

Ces simulations de DD avec montée ont également été utilisées pour étudier la coalescence d'une population de boucles prismatiques de nature lacunaire [175, 198]. Dans de telles simulations, la concentration en lacunes du milieu moyen, C_{V}^{∞}, est ajustée à chaque pas de temps en prenant en compte les lacunes émises ou absorbées par les différents segments afin de maintenir constant le nombre total de lacunes dans le système, c'est-à-dire

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

la somme des lacunes libres et des lacunes condensées dans les boucles prismatiques. On obtient alors une cinétique de coalescence où les boucles les plus grandes croissent en absorbant les lacunes émises par les boucles les plus petites qui elles décroissent. Cette cinétique de coalescence avait été modélisée par Kirchner [199] et par Burton et Speight [200] en se basant sur un modèle de tension de ligne. Le modèle obtenu (modèle KBS) conduit à des expressions analytiques de la distribution de taille des boucles, en particulier l'évolution temporelle du rayon moyen et de la la densité des boucles, ainsi que l'évolution de la sursaturation. Il s'agit de l'analogue de la théorie LSW [201, 202] pour des objets à deux dimensions croissant dans un milieu à trois dimensions. La comparaison de nos simulations DD avec ce modèle KBS [175] nous a permis de montrer sa pertinence, validant ainsi les hypothèses qui le sous-tendent.

Les simulations DD permettent d'aller au-delà de ce modèle KBS en autorisant les boucles de dislocation à glisser sur leur cylindre prismatique (cas des boucles prismatiques non fautées). Comme les échelles de temps associées aux mouvements de glissement et de montée sont très différentes, nous avons utilisé une approximation adiabatique : les microstructures de dislocation sont d'abord équilibrées vis à vis du glissement en utilisant un petit pas de temps. Lorsque ce glissement ne produit plus de déformation plastique, un macro-pas de temps où seule la montée est autorisée est alors exécuté. La prise en compte de ce glissement dans nos simulations DD [175] conduit à une accélération de la cinétique de coalescence. En effet, le glissement des boucles de dislocations sur leur cylindre prismatique entraine des collisions conduisant à la coagulation directe des boucles. Ces mêmes simulations de DD avec montée et glissement permettent également de reproduire l'instabilité d'une dislocations vis en présence d'une forte sursaturation de lacunes, conduisant à la création d'une hélice.

8.2 Montée conservative

La diffusion accélérée le long des lignes de dislocation (*pipe diffusion* [203, 204]) conduit à un mécanisme de montée dit conservatif [134]. Dans ce cas, la force motrice de montée provient des hétérogénéités de concentration de lacunes le long des lignes de dislocations. La diffusion de ces lacunes le long de la ligne permet une homogénéisation de cette concentration, conduisant ainsi à un possible déplacement à surface constante des boucles prismatiques perpendiculairement à leur cylindre de glissement.

Ce mécanisme de montée à été implémenté dans le code de DD aNuMoDis. En négligeant la montée par diffusion en volume, on montre que la vitesse de montée d'un segment de dislocation n de caractère θ_n, de vecteur

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

de Burgers $\vec{b}$ et de longueur l_n est donnée par

$$v_{\mathrm{cl}}^{n} = -\frac{\Omega}{l_n b \sin(\theta_n)} \pi {r_{\mathrm{c}}}^2 \sum_i J_{i\to n}^{\mathrm{p}}, \tag{8.1}$$

où Ω est le volume atomique et le rayon de capture r_{c} correspond à celui utilisé pour la diffusion en volume (Eq. 7.3). Dans cette équation, la somme court sur tous les segments i connecté au segment n. Le flux de diffusion du segment i au segment n est proportionnel au gradient de concentration de lacunes. En linéarisant ce gradient, on obtient donc

$$J_{i\to n}^{\mathrm{p}} = -\frac{D^{\mathrm{p}}}{\Omega} \frac{C_{\mathrm{V}}^{n} - C_{\mathrm{V}}^{i}}{\|\vec{r}_i - \vec{r}_n\|}. \tag{8.2}$$

D^{p} est le coefficient de diffusion des lacunes le long de la ligne de dislocation (défini pour le rayon de capture r_{c}). $\vec{r}_i$ est la position du segment de dislocation i et C_{V}^{i} la concentration de lacunes sur ce segment. En travaillant toujours dans l'hypothèse de dislocations saturées en crans et de diffusion suffisamment rapide le long de la ligne de dislocation, on peut supposer que cette concentration de lacunes est à l'équilibre sur les lignes de dislocation et est donc donnée par l'équation 7.1. Pour des forces de montée F_{cl} suffisamment faible, le flux de diffusion J_{p} est donc proportionnelle au gradient de F_{cl} (Eq. 8.2), conduisant à une vitesse de montée proportionnelle à la dérivée seconde de F_{cl} (Eq. 8.1). On retrouve ainsi le modèle de montée développé par Turunen *et al.* [180, 205, 206].

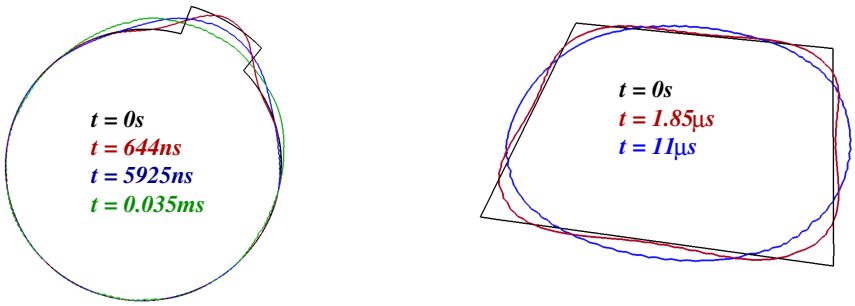


FIGURE 8.1 – Évolution temporelle de boucles de dislocations prismatiques associée avec la diffusion accélérée le long de la ligne de dislocation.

Les simulations de DD réalisées avec ce modèle de diffusion parviennent à reproduire les effets de la montée conservative. Ainsi la *pipe diffusion* conduit à un arrondissement des boucles prismatiques (Fig. 8.1) afin de minimiser leur tension de ligne. Le déplacement des boucles prismatiques perpendiculairement à leur cylindre de glissement peut également conduire à des

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

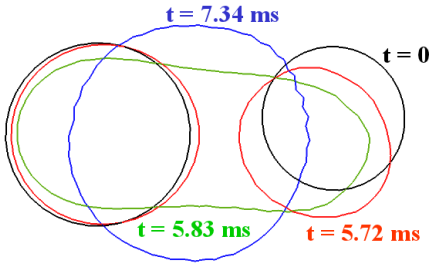


FIGURE 8.2 – Coalescence par *pipe diffusion* de deux boucles prismatiques de nature lacunaire.

phénomènes de coagulation (Fig. 8.2). Au cours de tous ces phénomènes, la surface totale des boucles prismatiques est conservées puisque les lacunes émises à un point de la boucle sont absorbées en un autre point de la boucle.

Il est bien entendu possible de considérer à la fois la montée par diffusion en volume et par diffusion accélérée le long des lignes de dislocation. Pour ce faire, il suffit d'ajouter dans l'équation 8.1 de la vitesse de montée des segments le flux de diffusion en volume (Eq. 7.3). Néanmoins, comme les deux mécanismes de diffusion ne sont pas forcément associés à la même échelle de temps, il peut s'avérer nécessaire d'utiliser une approximation adiabatique comme nous l'avons fait précédemment avec le glissement afin de séparer les deux échelles.

8.3 Perspectives

Les simulations de DD avec montée que nous avons réalisées constituent des premiers cas tests destinés à valider notre implémentation de la montée dans un code de DD. Cette étape de vérification effectuée, il apparait opportun d'utiliser le nouvel outil de simulation ainsi développé pour des situations plus complexes impliquant la montée des dislocations. De telles simulations de DD peuvent à présent être utilisées pour étudier les phénomènes de fluage et de restauration. En particulier, elles pourraient permettre de mieux comprendre la formation des sous-joints de polygonisation observés à haute température [190, 191]. Le seul point potentiellement bloquant pour une telle étude est le nombre de segments de dislocation beaucoup plus important que le code de DD devrait gérer par rapport à ce qui a été fait jusqu'à présent.

Du point de vue du modèle de montée utilisé dans ces simulations de DD, sa limite principale réside dans l'hypothèse que les lacunes sont à l'équilibre le long des lignes de dislocation. Comme nous l'avons souligné au précédent chapitre, il est nécessaire pour aller au-delà de cette hypothèse de traiter plus explicitement les crans sur les lignes de dislocation. La prise en compte de ces crans sur la vitesse de montée peut être facilement prise en compte

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

via la théorie de la diffusion [187]. Par contre, il est également nécessaire de pouvoir décrire la cinétique d'évolution de la population de crans sur les différents segments de dislocation. Ceci nécessite en particulier de pouvoir modéliser la germination de ces crans. En l'absence d'information sur les mécanismes sous-jacents, une étude à l'échelle atomique de la germination des crans apparait nécessaire avant d'implémenter un tel modèle de montée dans des simulations de DD. De telles simulations de DD permettraient alors de rendre compte de la forme différente parfois observée entre les boucles prismatiques qui croissent et celles qui décroissent [187] : les boucles qui croissent prennent une forme polygonale à cause de la difficulté à germer de nouveaux crans, tandis que celles qui décroissent garde une forme plus arrondie. Cette prise en compte de la germination des crans, ainsi que de la *pipe diffusion*, permettrait en outre de rendre compte, dans des simulations de fluage par exemple, d'énergie d'activation différente de l'énergie d'activation de la diffusion en volume des lacunes.

Une autre hypothèse de notre modèle de montée est que la concentration en lacune, définie par C_{V}^{∞}, est homogène dans le système. Les travaux récents de Keralavarma avec Benzerga [176] ont montré qu'il était possible d'aller au-delà de cette hypothèse en couplant le modèle de montée à une résolution par différence finie de la diffusion en volume des lacunes. Les simulations de DD réalisées permettent alors de rendre compte des différents régimes de fluage, fluage de type Nabarro-Herring contrôlé par la diffusion en volume des lacunes à faible contrainte et fluage contrôlé par la montée et le glissement des dislocations à plus forte contrainte. Ces simulations ayant été réalisées avec un code de DD à deux dimensions [176], l'implémentation dans un code à trois dimensions reste à effectuer.

Enfin, l'étude du comportement sous irradiation nécessite de considérer non seulement la montée associée à la diffusion des lacunes mais également celle provenant de la diffusion des interstitiels. La loi de mobilité associée aux interstitiels s'obtient de la même façon que pour les lacunes, l'interaction élastique avec les dislocations plus importantes se traduisant par un rayon de capture plus grand.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Conclusion et perspectives

La modélisation à l'échelle atomique des dislocations nécessite de développer des techniques de simulation adaptées, afin de bien prendre en compte le champ élastique à longue distance créé par la dislocation. Ceci est d'autant plus vrai pour les calculs ab initio du fait de la petite taille des boîtes de simulation qu'il est possible d'utiliser. En nous appuyant sur la théorie élastique des dislocations, nous avons développé une approche de modélisation permettant d'étudier les propriétés des cœurs de dislocation et d'extraire de nos simulations des données quantitatives, que ces simulations reposent sur des potentiels empiriques ou des calculs ab initio. Cette approche nous a permis d'étudier les propriétés des dislocations dans le fer cubique centré et dans le zirconium hexagonal compact, deux métaux d'intérêt pour l'industrie nucléaire.

Plasticité des métaux de structure cubique centrée

Notre étude des dislocations dans le fer montre que la dislocation mixte $\langle 111 \rangle$ possède potentiellement un comportement particulier, sa contrainte de Peierls étant plus élevée que pour les orientations autres que la vis. Ce résultat surprenant, obtenu avec des potentiels empiriques, reste à valider par calculs ab initio. Les premiers essais de simulation ab initio s'étant révélés non concluants avec des conditions aux limites périodiques, un changement de technique de simulation s'avère nécessaire : la méthode de l'agrégat à bords flexibles reposant sur les fonctions de Green de réseau [6, 8, 10] devra donc être implémentée pour répondre à cette question. Si ce résultat se confirme, il reste à en comprendre les conséquences éventuelles à une échelle supérieure en étudiant l'impact potentiel de cette friction de réseau importante pour la dislocation mixte $\langle 111 \rangle$ sur le développement de la microstructure de dislocations.

Plasticité des métaux de structure hexagonale compacte

Dans le zirconium, nos calculs ab initio montre qu'il est possible d'estimer la contrainte de Peierls même lorsque celle-ci est faible et qu'un bon accord peut être obtenu avec les données expérimentales. L'analyse de la

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

littérature expérimentale indique clairement que la plasticité du zirconium, tout comme le titane, est pilotée par l'interaction des dislocations vis avec les impuretés d'oxygène. La prochaine étape de ce travail de modélisation de la plasticité du zirconium passe bien entendu par une étude de cette interaction. Actuellement, seuls les calculs ab initio semblent à même d'étudier de tels effets d'alliage. Ceci constitue le sujet de thèse de Nermine Chaari. En outre, la structure hexagonale du zirconium induit une richesse du comportement plastique. Si le glissement principal, s'effectuant dans les plans prismatiques, est à présent bien compris dans le zirconium pur, ceci est loin d'être le cas pour les glissements secondaires. Toujours dans le cadre de la thèse de Nermine Chaari, nous avons entrepris une étude de ces modes de glissement secondaire en calculant ab initio les barrières d'énergie pour faire glisser dans un plan pyramidal ou dans un plan basal une dislocation initialement étalée dans un plan prismatique. Le but est de pouvoir au final caractériser les différents systèmes de glissement d'une dislocation de vecteur de Burgers $1/3\langle 1\bar{2}10\rangle$, en décrivant notamment l'activation thermique nécessaire pour les modes secondaires. De tels résultats, obtenus directement à l'échelle atomique, pourront ensuite être utilisées dans un code de dynamique des dislocations (DD) pour effectuer un changement d'échelle.

Nous développons actuellement dans le titane le même travail de modélisation des propriétés de la dislocations vis $\langle 1\bar{2}10\rangle$. Les mécanismes contrôlant la plasticité sont identiques dans le zirconium et le titane. En abordant de front ces deux métaux de transition, nous pourrons plus facilement confronter les résultats de nos simulations atomiques aux observations expérimentales disponibles dans la littérature, d'autant plus que des données obtenues pour des métaux purs, et non des alliages industriels, sont plus nombreuses dans le cas du titane que du zirconium.

Les métaux hexagonaux compacts peuvent également se déformer par mâclage. La contrainte nécessaire pour activer le mâclage augmente avec la température, si bien qu'il y a un point de croisement avec la contrainte activant le glissement des dislocations. Par conséquent, le mâclage est un mode de déformation se manifestant à basse température et forte vitesse de déformation. Il a été observé par ailleurs que l'addition d'oxygène diminue l'activité de mâclage dans le zirconium et, dans une moindre mesure, le titane, en ralentissant a priori la croissance des mâcles [207]. Il serait donc intéressant d'utiliser les calculs ab initio pour étudier l'interaction avec une impureté d'oxygène des différentes mâcles observées dans le zirconium et le titane.

Montée des dislocations

Nos travaux sur la montée des dislocations montrent qu'avec une loi de mobilité simple, partiellement validée par une comparaison avec des simulations atomiques, il est possible de prendre en compte la montée dans un code

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

de DD et de reproduire nombre de phénomènes expérimentaux associés. La perspective est bien entendu d'utiliser un tel outil de simulation pour s'intéresser à présent au fluage et à l'évolution de microstructures de dislocation. L'extension du modèle de montée avec la prise en compte de la diffusion des interstitiels devrait permettre de réaliser des simulations en DD du fluage sous irradiation.

Il apparait également opportun d'améliorer notre description de la montée en décrivant réellement l'influence des crans sur les lignes de dislocation. C'est une problématique encore assez peu traitée à laquelle les simulations atomiques peuvent apporter des éléments de réponse. En particulier, des calculs de barrière en potentiel empirique permettraient d'avoir une meilleure connaissance des mécanismes mis en jeu lors de la germination des crans. In fine, une loi de mobilité en montée des dislocations prenant pleinement en compte les mécanismes élémentaires mis en jeu au niveau des crans devrait permettre une meilleure description de la montée dans les différents régimes de température et de contrainte.

Soulignons enfin que ces travaux sur la montée concernent pour l'instant les métaux purs. Les effets d'alliage ou la montée dans les alliages ordonnés est un domaine encore relativement vierge où, là encore, les simulations atomiques devraient permettre de mieux comprendre les mécanismes élémentaires mis en jeu.

Évolution sous irradiation

Au cours du post-doc de Céline Varvenne, nous avons commencé à travailler sur les effets d'irradiation dans le zirconium. Les calculs ab initio nous ont permis d'étudier l'énergétique des défauts ponctuels, lacunes et interstitiels, et de leurs amas créés au cours de l'irradiation. Le but est non seulement de fournir à des outils de simulation cinétiques, comme la dynamique d'amas, des grandeurs quantitatives sur les énergies de formations des différents complexes de défaut, mais également de caractériser la diffusion des lacunes et intersitiels, en particulier l'anisotropie de diffusion et l'influence d'une contrainte appliquée. En s'appuyant sur les résultats de ces simulations atomiques et un travail de modélisation cinétique, nous souhaitons pouvoir expliquer à terme le fait qu'il y a coexistence de boucles lacunaires et interstitielles, et que des boucles lacunaires résidant dans les plans de base (boucles $\langle c \rangle$) apparaissent à forte dose d'irradiation, alors qu'elles résident uniquement dans les plans prismatiques initialement (boucles $\langle a \rangle$). Il s'agit d'une question d'intérêt technologique puisque l'apparition des boucles $\langle a \rangle$ est corrélée à une accélération de la croissance observée à une échelle macroscopique sur les assemblages de combustibles réalisés en alliage de zirconium. Une fois identifiés les paramètres clefs contrôlant ce comportement sous irradiation, nous étudierons l'effet d'éléments d'alliage comme Nb, Fe, ou Sn, ceux-ci étant connus pour influencer la présence de boucles $\langle c \rangle$.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Annexe A

Énergie de cœur et simulations de dynamique des dislocations

Cette annexe décrit une étude réalisée avec Xiangjun Shi, en thèse au SRMA (CEA Saclay) sous la direction de Laurent Dupuy et Benoit Devincre, illustrant comment les informations sur les dislocations obtenues par simulations atomiques peuvent être utiles aux simulations de dynamique des dislocations (DD). Nous montrons en particulier la nécessité d'utiliser les énergies de cœur calculées précédemment dans le fer (§3.2) pour fixer la valeur d'un paramètre d'entrée de ces simulations de DD.

La gestion de la tension de ligne est un problème délicat dans les simulations de DD à cause de l'existence d'une singularité des champs élastiques au cœur des dislocations et de la longue portée des interactions élastiques. Une façon de résoudre ce problème est d'utiliser le formalisme non singulier des champs élastiques des dislocations développé par Cai *et al.* [208]. Celui-ci fait disparaitre la discontinuité des champs en considérant que le cisaillement associé aux dislocations possède un certain étalement caractérisé par un paramètre a au lieu d'être localisé. Il s'agit d'une astuce mathématique et le paramètre d'étalement a n'a pas de véritable signification physique. La question se pose néanmoins de la valeur qu'il faut lui donner et de la sensibilité des résultats de DD à celui-ci.

Ce formalisme élastique non singulier a été implémenté dans le code DD aNuMoDis développé au SRMA et au SIMaP (INP Grenoble). Des simulations réalisées par Xiangjun Shi de l'activation d'une source de Frank-Read dans le fer cubique centré montrent que la contrainte d'activation dépend fortement du paramètre d'étalement a (Fig. A.1). La dépendance est logarithmique et s'accentue lorsque la taille de la source diminue.

Afin de comprendre cette dépendance, on peut utiliser l'expression donnée par Foreman [209] de la contrainte d'activation d'une source de Frank-Read. Pour une source de type coin, de vecteur de Burgers b et de longueur

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

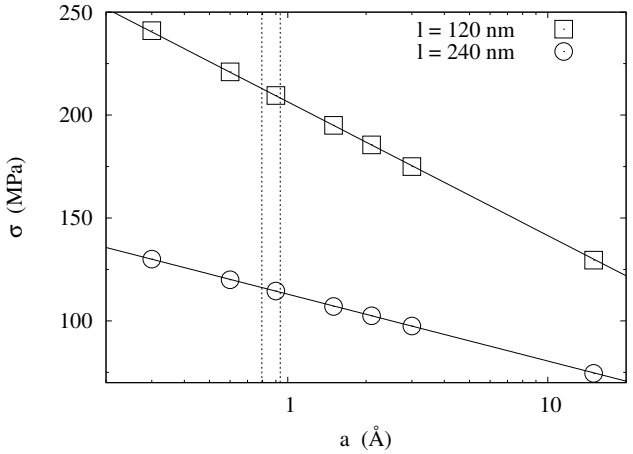


FIGURE A.1 – Contrainte d'activation d'une source de Frank-Read de type coin pour deux longueurs l de la source différentes. Les symboles correspondent aux simulations DD pour différents paramètres d'étalement a et les lignes à l'équation A.3 avec $B' = 0.228$.

l, cette contrainte s'écrit

$$\sigma_{\mathrm{c}} = \frac{\mu b}{2\pi l}\left[\ln\left(\frac{l}{r_{\mathrm{c}}}\right) + B\right] + \frac{2(1-\nu)}{bl}E^{\mathrm{core}}, \tag{A.1}$$

où μ et ν sont respectivement le module de cisaillement et le coefficient de Poisson, [1] et E^{core} est l'énergie du cœur définie pour un rayon de cœur r_{c}. Le coefficient B n'a pas d'expression précise et dépend des conditions imposées aux points d'ancrage de la source.

La seconde étape consiste ensuite à relier énergie de cœur E^{core} et paramètre d'étalement a. En calculant dans le formalisme élastique non singulier l'énergie stockée par une dislocation rectiligne infinie dans un cylindre et en l'identifiant à la même énergie donnée par le formalisme classique (Eq. 2.4), on obtient l'énergie de cœur d'une dislocation de caractère θ

$$E^{\mathrm{core}} = \frac{\mu b^2}{4\pi}\left[\cos^2\theta + \frac{\sin^2\theta}{1-\nu}\right]\ln\left(\frac{r_{\mathrm{c}}}{a}\right) + \frac{1}{12}\frac{\mu b^2}{4\pi}\left[\cos^2\theta - \frac{2+\nu}{(1-\nu)^2}\sin^2\theta\right]. \tag{A.2}$$

1. Pour fixer ces coefficients μ et ν alors que le cristal est anisotrope, nous reprenons la proposition de Scattergood et Bacon [210, 211] en imposant que les facteurs prélogarithmiques de l'énergie élastique d'une dislocation rectiligne donnés par la théorie élastique anisotrope et par la théorie élastique isotrope soient égaux pour les deux orientations extrêmes que sont la vis et la coin.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Ceci conduit donc à la contrainte d'activation suivante pour la source de Frank-Read

$$\sigma_{\mathrm{c}} = \frac{\mu b}{2\pi l}\left[\ln\left(\frac{l}{a}\right) + B'\right]. \tag{A.3}$$

La nouvelle constante B' peut être reliée à la constante B apparaissant dans l'équation A.1 via les constantes élastiques. Cette expression reproduit parfaitement les résultats des simulations DD (Fig. A.1). La dépendance logarithmique observée cache donc une dépendance à l'énergie de cœur, implicitement introduite via le paramètre a.

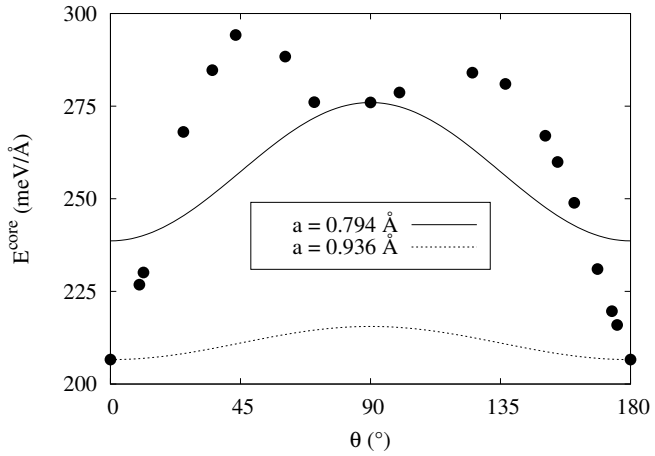


FIGURE A.2 – Énergie de cœur d'une dislocation $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ dans le fer en fonction de son caractère ($r_{\mathrm{c}} = b$). Les symboles correspondent aux simulations atomiques (§3.2) et les lignes à l'élasticité non singulière (Eq. A.2) pour deux paramètres d'étalement a différents.

Dès lors, il semble logique de fixer ce paramètre a afin d'introduire dans les simulations DD une énergie de cœur mieux justifiée physiquement. Pour cela, nous avons utilisé les énergies de cœur calculées par simulations atomiques dans le fer (§3.2). Ces énergies de cœur sont comparées sur la figure A.2 au résultat obtenu avec l'équation A.2. De cette étude, il ressort qu'il n'est pas possible d'avoir un seul paramètre a reproduisant toutes les énergies de cœur, quel que soit le caractère de la dislocation. On peut par convention le fixer par rapport à l'orientation coin ($a = 0.794\,\text{Å}$) ou la vis ($a = 0.936\,\text{Å}$), définissant ainsi une fenêtre acceptable pour ce paramètre (*cf.* traits verticaux sur la figure A.1).

En conclusion, le formalisme non singulier, via son paramètre d'étalement a, introduit une énergie de cœur dans les simulations DD. Il apparaît

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

important de ne pas donner une valeur trop grande à ce paramètre, [2] car cela conduit dès lors à des énergies de cœur trop petites, voire même négatives. La valeur raisonnable pour ce paramètre d'étalement a peut paraitre petite au vu de l'étalement réel du cœur, tel qu'observé par exemple dans nos simulations atomiques ou prédit par un modèle de type Peierls-Nabarro [70, 71]. Cependant, il est normal de devoir utiliser un paramètre a petit. En effet, l'étalement du cœur de la dislocation dans ce formalisme non singulier [208] conduit seulement à une diminution de l'énergie élastique. Il n'y a pas en contre partie un coût énergétique lié au développement d'une faute d'empilement, comme cela est fait dans le modèle de Peierls-Nabarro. Une valeur trop grande de a conduirait donc à une diminution trop importante de l'énergie de la dislocation.

2. Ceci peut apparaître en contradiction avec la philosophie de la théorie élastique non singulière [208] puisque ce formalisme peut également avoir pour but d'émousser les champs élastiques pour limiter les problèmes d'instabilité numérique lorsque deux segments de dislocation se rapprochent.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Annexe B

Énergie de formation d'un décrochement

B.1 Décrochements et rayons de cœur

L'énergie de cœur $E_{r_c}^{\text{core}}(\theta)$ d'une dislocation de caractère θ est définie pour un rayon de cœur r_c donné permettant de partitionner l'énergie entre contribution élastique et contribution du cœur. Si on veut définir cette énergie pour un autre rayon de cœur r'_c, on obtiendra une nouvelle valeur de l'énergie de cœur $E_{r'_c}^{\text{core}}(\theta)$:

$$E_{r'_c}^{\text{core}}(\theta) = E_{r_c}^{\text{core}}(\theta) + \frac{1}{2} b_i K_{ij}^0(\theta) b_j \ln\left(\frac{r'_c}{r_c}\right).$$

Ainsi, l'énergie totale de la dislocation stockée dans un cylindre de rayon R_∞ ne dépend pas du choix de rayon de cœur :

$$\begin{aligned} E(R_\infty) =& E_{r_c}^{\text{core}}(\theta) + \frac{1}{2} b_i K_{ij}^0(\theta) b_j \ln\left(\frac{R_\infty}{r_c}\right) \\ =& E_{r'_c}^{\text{core}}(\theta) + \frac{1}{2} b_i K_{ij}^0(\theta) b_j \ln\left(\frac{R_\infty}{r'_c}\right). \end{aligned}$$

Comme l'énergie de formation d'un décrochement E^{kink} est obtenue à partir des variations de l'énergie de cœur en fonction du caractère de la dislocation (Éq. 3.1), on peut dès lors se demander si E^{kink} dépend également du choix de rayon de cœur. Pour le vérifier, on considère à nouveau l'expression de l'énergie de cœur d'une dislocation mixte à forte composante vis (Éq. 3.1). On effectue désormais un développement limité jusqu'à l'ordre 2 en θ, sans pour autant donner de signification physique au coefficient a_2 du terme d'ordre 2 :

$$E_{r_c}^{\text{core}}(\theta) = E_{r_c}^{\text{core}}(0) + \theta \frac{E^{\text{kink}}}{\lambda_P} + a_2 \theta^2.$$

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

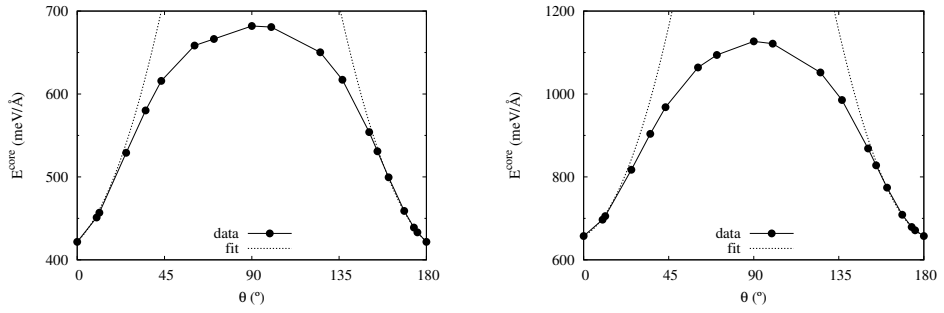
En considérant à présent les énergies de cœur $E^{\text{core}}_{r'_c}$ définies pour un autre rayon de cœur r'_c, on obtient

$$E^{\text{core}}_{r'_c}(\theta) = E^{\text{core}}_{r'_c}(0) + \frac{1}{2} b_i \left[K^0_{ij}(\theta) - K^0_{ij}(0) \right] b_j \ln\left(\frac{r_c}{r'_c}\right) + \theta \frac{E^{\text{kink}}}{\lambda_P} + a_2 \theta^2 .$$

Un développement au second ordre en θ de la matrice de Stroh $K^0_{ij}(\theta)$ conduit à

$$\begin{aligned} E^{\text{core}}_{r'_c}(\theta) = & E^{\text{core}}_{r'_c}(0) + \theta \left[\frac{E^{\text{kink}}}{\lambda_P} + \frac{1}{2} b_i \left. \frac{\partial K^0_{ij}}{\partial \theta} \right|_{\theta=0} b_j \ln\left(\frac{r_c}{r'_c}\right) \right] \\ & + \theta^2 \left[a_2 + b_i \left. \frac{\partial^2 K^0_{ij}}{\partial \theta^2} \right|_{\theta=0} b_j \ln\left(\frac{r_c}{r'_c}\right) \right] . \end{aligned} \tag{B.1}$$

Lorsque l'énergie élastique est minimale pour l'orientation vis, la dérivée première de $K^0_{ij}(\theta)$ est nulle en $\theta = 0$. Ceci est le cas pour le système de glissement $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ dans un cristal cubique. Par conséquent, la partie linéaire de l'équation B.1, et donc l'énergie de formation d'un décrochement E^{kink}, est indépendante du choix du rayon de cœur r_c. Par contre, la partie harmonique en dépend, c'est-à-dire que le domaine sur lequel on observe une variation linéaire de l'énergie de cœur dépend de r_c.



(a) $r_c = 3b$ (b) $r_c = 10b$

FIGURE B.1 – Énergie de cœur en fonction du caractère de la dislocation pour deux valeurs différentes du rayon de cœur r_c. Les lignes pointillées correspondent au modèle de décrochement (Éq. B.1) ajusté sur les données pour $r_c = b$ (Fig. 3.2) en supposant $a_2 = 0$.

Afin d'illustrer le fait que l'énergie de formation d'un décrochement sur une dislocation vis est indépendante du choix du rayon de cœur, nous avons reporté sur la figure B.1 les énergies de cœur d'une dislocation $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ dans le fer calculées précédemment (§3.2) en utilisant deux valeurs différentes

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

du rayon de cœur, $r_c = 3b$ et $r_c = 10b$. Sur cette figure apparaît également la courbe correspondant au modèle de décrochement (Éq. B.1), où nous avons utilisé les énergie de formation d'un décrochement déterminées section 3.2 pour $r_c = b$, en supposant $a_2 = 0$. Quelque soit la valeur du rayon de cœur choisie, ce modèle décrit correctement l'énergie de cœur des dislocations mixtes à forte composante vis.

B.2 Décrochements et conditions aux limites périodiques

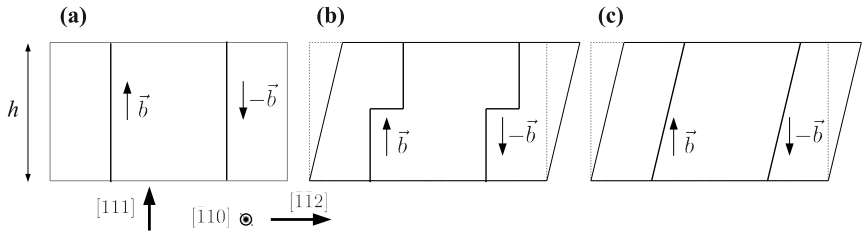


FIGURE B.2 – Représentation schématique des différentes boîtes de simulation considérées pour définir l'énergie de formation d'un décrochement sur une dislocation vis. Boîtes avec un dipôle (a) de dislocations vis parfaites, (b) de dislocations vis décrochées et (c) de dislocations mixtes équivalentes.

Les valeurs que nous avons obtenues pour les énergies de formation d'un décrochement sur une dislocation vis dans le fer ($E^{\text{kink}} = 311\,\text{meV}$ pour le décrochement de type V et 280 meV pour celui de type I) diffèrent de celles obtenues par Ventelon *et al.* [66] (respectivement 80 et 570 meV), bien que le même potentiel empirique ait été utilisé. Les méthodes de simulation utilisées dans les deux études ne sont pas les mêmes. Nous utilisons une approche agrégat pour simuler la dislocation décrochée, l'énergie de formation étant ensuite déduite de l'énergie de cœur de la dislocation. Dans les simulations de Ventelon *et al.* [66], des conditions aux limites tri-périodiques sont utilisées et l'énergie de formation du décrochement est défini comme la différence d'énergie entre la boîte de simulation contenant une dislocation vis décrochée (Fig. B.2b) et une dislocation vis parfaite (Fig. B.2a). Les énergies de formation d'un décrochement ainsi obtenues sont représentées sur la figure B.3a pour différentes tailles de boîte, montrant une convergence vers une valeur constante pour des boîtes de dimension h suffisamment importante le long de la ligne de dislocation. Pour des dimensions h plus petites, une variation de E^{kink} en $1/h$ est observée [66].

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

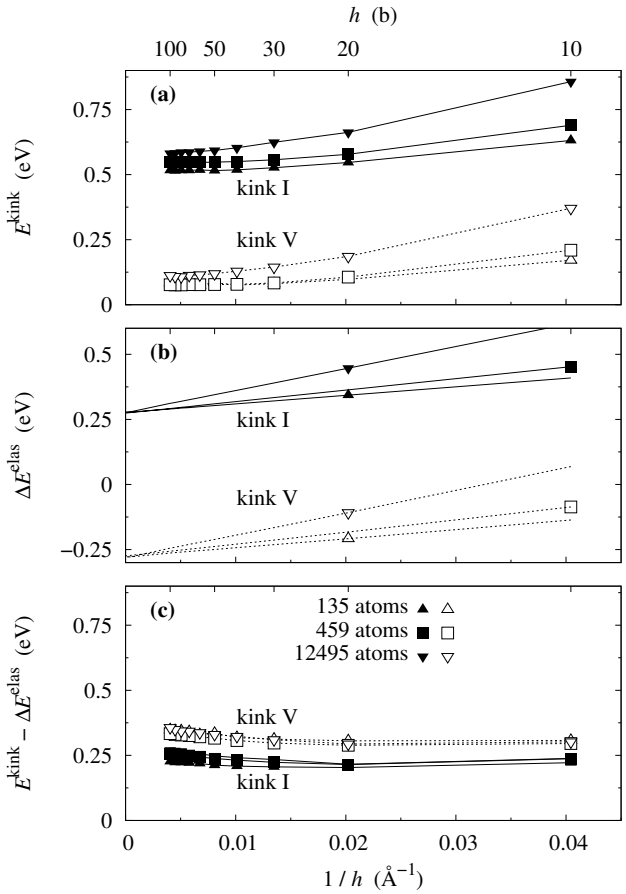


FIGURE B.3 – Énergie de formation d'un décrochement de type interstitiel (I) ou lacunaire (V) en fonction de l'inverse de la hauteur h de la cellule dans la direction vis [111] pour différentes tailles de boîte perpendiculairement à la direction vis. Ces tailles sont caractérisées par le nombre d'atomes par unité de vecteur de Burgers. E^{kink} correspond aux données brutes extraites des simulations atomiques [66] et ΔE^{elas}est la correction élastique appliquée pour prendre en compte les interactions à longues distances entre dislocations décrochées dues aux conditions aux limites périodiques.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

La différence de résultats entre les deux méthodes de simulation s'explique en partie par une contribution élastique non prise en compte lorsque l'énergie de formation d'un décrochement est simplement obtenue par la différence d'énergie, après relaxation des atomes, entre les deux boîtes de simulation schématisées sur les figures B.2a et b. Cette procédure néglige le fait que l'énergie élastique provenant de l'interaction du dipôle de dislocations avec ses images périodiques n'est pas la même pour un dipôle de dislocations vis parfaites ou décrochées. Cette différence d'énergie élastique, ΔE^{elas}, ne doit pas être incorporée dans la définition de l'énergie de formation d'un décrochement : il faut la retrancher de E^{kink}.

ΔE^{elas} peut être estimée en remarquant qu'à suffisamment longue distance la dislocation vis décrochée s'apparente à une dislocation mixte rectiligne (Fig. B.2c). Nous calculons donc ΔE^{elas} en faisant la différence d'énergie élastique entre la boîte contenant un dipôle de dislocations mixtes (Fig. B.2c) et celle contenant un dipôle de dislocations vis parfaites (Fig. B.2a). Les résultats, présentées sur la figure B.3b, montrent que cette correction élastique n'est pas négligeable par rapport aux valeurs de E^{kink} directement extraites des simulations atomiques. Elle est en outre différente pour les deux types de décrochements, convergeant pour les tailles de boîte suffisamment grandes vers $\pm 270\,\text{meV}$. Cette convergence est en $1/h$, le facteur de proportionnalité ne dépendant pas du type de décrochement, mais seulement de la taille de la boîte de simulation perpendiculairement à la ligne de dislocation.

La figure B.3c montre que la différence d'énergie $E^{\text{kink}} - \Delta E^{\text{elas}}$ converge bien vers une valeur constante, $\sim 250\,\text{meV}$ pour le décrochement de type I et $\sim 350\,\text{meV}$ pour le type V. Ces valeurs, corrigées des effets élastiques, sont en bien meilleur accord avec les valeurs obtenues à la section 3.2.

Comme la correction élastique à appliquer aux deux types de décrochements diffère seulement par son signe pour des boîtes de simulation suffisamment grandes, la somme de ces deux énergies de formation aboutit à l'énergie de formation d'un double décrochement [1] [66], que la correction élastique soit prise en compte ou non. Ceci n'est qu'une manifestation de l'observation formulée par Hirth et Lothe (chap. 8.5 dans [4] et chap. 6.3 dans [30]) de la difficulté à définir l'énergie de formation d'un simple décrochement, alors que l'énergie de formation d'un double décrochement est quant à elle parfaitement définie.

Swinburne *et al.* [212] sont également arrivés à la conclusion que la différence apparente d'énergie entre les deux types de décrochements provient du champ élastique à longue distance crée par le décrochement. Pour cela, ils ont calculé dans leurs simulations atomiques une densité locale d'énergie d'excès due à la présence du décrochement sur la dislocation vis. Proche du décrochement, les deux types de décrochement conduisent au même pic de

1. Pour un double décrochement suffisamment séparé, l'énergie d'interaction des deux décrochements peut être négligée

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

densité énergétique. Par contre, la queue de la densité observée à longue distance diffère entre les deux types de décrochement. Cette analyse est donc en accord avec notre interprétation basée sur le modèle élastique développé précédemment.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Annexe C

Potentiel de Peierls et contrainte appliquée

Nous avons essayé de déterminer dans le fer c.c. le potentiel de Peierls sous contrainte des dislocations $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ pour l'orientation vis et l'orientation mixte [111], c'est-à-dire les deux orientations conduisant à la contrainte de Peierls la plus élevée parmi celles que nous avons examinées (§3.4). L'idée est de voir si nous retrouvons le résultat de Rodney et Proville [68] montrant que le potentiel de Peierls de la dislocation vis dépend de la contrainte appliquée et également de voir ce qu'il en est dans le cas de l'orientation mixte.

C.1 Méthode

Le calcul est effectué avec le potentiel EAM de Mendelev *et al.* [36]. Nous utilisons toujours des conditions aux limites tri-périodiques dans nos simulations. La contrainte est appliquée en imposant une déformation ε_{ij} suivant l'équation 1.2, cette déformation restant fixe le long de la barrière. À cause de cette contrainte appliquée, les deux dislocations de signe opposé composant le dipôle doivent être déplacées dans leur plan de glissement dans une direction opposée (Fig. C.1) : le travail de la force de Peach-Koehler, induite par la contrainte appliquée sur chaque dislocation, est donc le même.

Le calcul atomique par la méthode NEB donne la variation d'énergie ΔE des deux dislocations lorsque celles-ci glissent d'une vallée de Peierls à la vallée voisine. Cette variation d'énergie comprend deux contributions : le potentiel de Peierls W_P et la variation d'énergie élastique ΔE^elas. En effet, la contrainte appliquée conduit à une variation de l'énergie élastique via le travail des forces de Peach-Koehler. En outre, comme la distance entre les deux dislocations n'est pas constante le long de la barrière (Fig. C.1), il y a également une variation d'énergie élastique. Le potentiel de Peierls sous

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

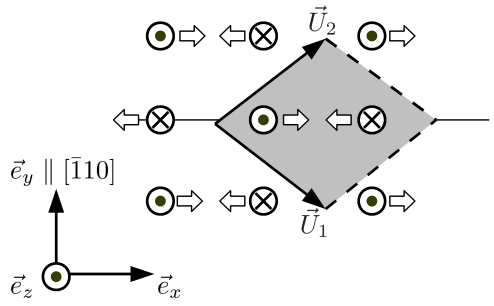


FIGURE C.1 – Schéma du réseau périodique de dislocations utilisé pour calculer les barrières de Peierls sous contrainte. Les flèches blanches indiquent le mouvement des dislocations.

contrainte sera donc obtenu après avoir retranché du résultat ΔE du calcul NEB, ces différentes contributions élastiques.

Pour pouvoir calculer cette variation de l'énergie élastique, il nous faut extraire de nos simulations atomiques les positions des dislocations. Nous avons testé différentes méthodes :

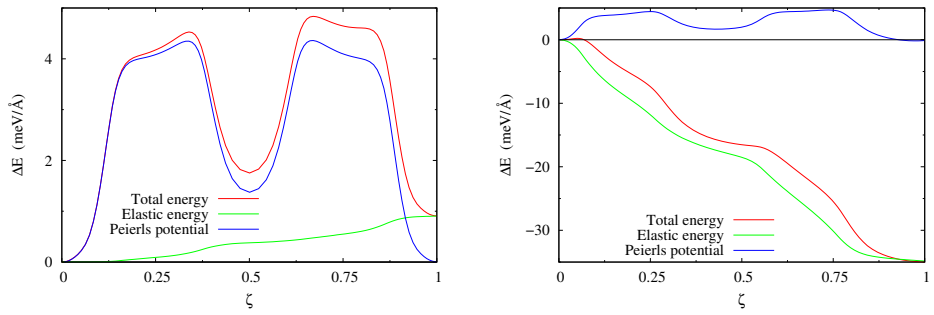
- Discontinuité de déplacement : la discontinuité de déplacement extraite des simulations atomiques est ajustée par le modèle de Peierls-Nabarro, comme nous l'avons déjà fait pour le calcul des barrières de Peierls hors contrainte (§3.3).
- Carte de Vitek : la carte des déplacements différentiels projetés dans la direction vis, dite carte de Vitek [137], extraite des simulations atomiques est ajustée par la carte prédite par la théorie élastique (avec prise en compte de l'anisotropie et de la périodicité). La méthode n'a été appliquée qu'à l'orientation vis.
- Contrainte : comme la déformation totale ε_{ij} appliquée à la boîte de simulation est fixe, tout mouvement des dislocations entraîne une variation de la déformation plastique ε^0_{ij} et donc une variation de la contrainte (§1.1.3). Cette variation de la contrainte est proportionnelle à l'inverse de la surface S de la boîte de simulation projetée perpendiculairement à la ligne de dislocation. Elle est donc faible pour des boîtes suffisamment grande, mais peut néanmoins être utilisée pour définir la position de la dislocation via l'équation 1.4.

Connaissant pour chaque coordonnée de réaction la position des dislocations, nous pouvons calculer la variation d'énergie élastique et la retrancher de la variation d'énergie donnée par la méthode NEB pour obtenir ainsi le potentiel de Peierls sous contrainte. La méthode est illustrée sur la figure C.2 dans le cas de la dislocation vis. Cette figure montre la capacité de la théorie élastique à prédire de façon quantitative la variation d'énergie lorsque les

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013



(a) 1479 atomes - $\tau = 0\,\mathrm{GPa}$ (b) 1479 atomes - $\tau = 1\,\mathrm{GPa}$

FIGURE C.2 – Variation de l'énergie totale et de l'énergie élastique en fonction de la coordonnée de réaction pour une dislocation vis $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ dans le fer calculée dans une boîte à 1479 atomes pour des déformation imposées correspondant à deux contraintes appliquées τ différentes. L'énergie de Peierls est la différence entre ces deux énergies. Les positions des dislocations, nécessaires pour calculer la variation d'énergie élastique, ont été déduites des variations de la contrainte.

dislocations bougent, puisqu'on retrouve un état initial et un état final avec la même énergie après avoir retranché la contribution élastique. Le potentiel de Peierls s'obtient ensuite en traçant la variation d'énergie non plus en fonction de la coordonnée de réaction, mais en fonction de la position de la dislocation.

Nous examinons par la suite plus en détails les résultats obtenus pour les deux orientation considérées de la dislocation avec les différentes définitions possibles pour la position de la dislocation.

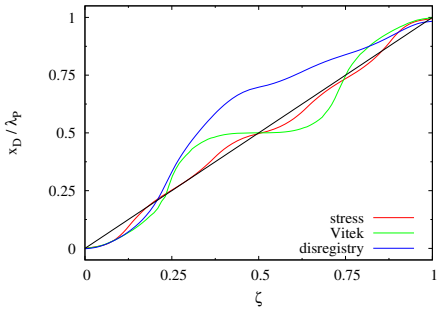
C.2 Dislocation vis

Les positions de la dislocation vis en fonction de la coordonnée de réaction obtenues avec les trois méthodes décrites précédemment sont représentées sur la figure C.3 pour trois tailles de boîtes et deux contraintes appliquées différentes, $\tau = 0$ et $1\,\mathrm{GPa}$, la contrainte de Peierls valant $1.23\,\mathrm{GPa}$.

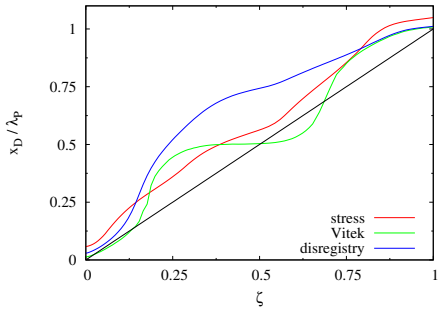
Pour $\tau = 0$, les trois méthodes prédisent la même position pour l'état initial et l'état final, ces deux états correspondant bien aux fonds des vallées de Peierls. Par contre, les méthodes donnent des trajectoires différentes entre ces deux états. En particulier, la position obtenue par l'intermédiaire de la discontinuité de déplacement n'est pas symétrique par rapport au milieu de la barrière ($\zeta = 0.5$), alors que la position obtenue par l'intermédiaire soit de la contrainte, soit de la carte de Vitek, est bien symétrique.

© 2014 Tous droits réservés.

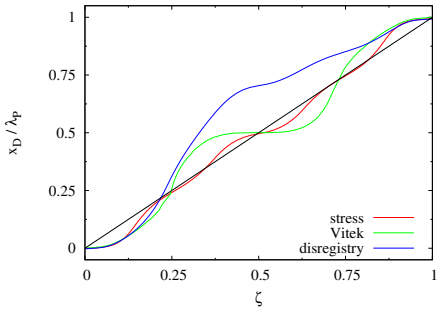
doc.univ-lille1.fr



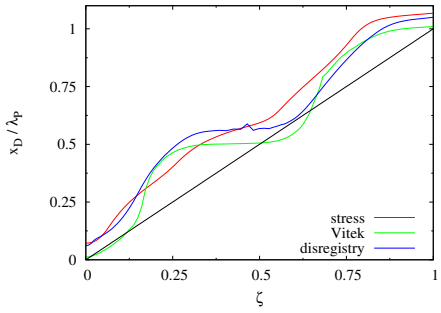
(a) 459 atomes - $\tau = 0\,\mathrm{GPa}$



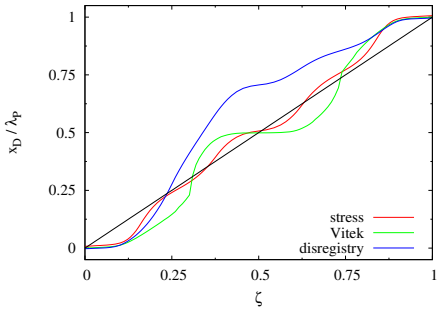
(b) 459 atomes - $\tau = 1\,\mathrm{GPa}$



(c) 1479 atomes - $\tau = 0\,\mathrm{GPa}$



(d) 1479 atomes - $\tau = 1\,\mathrm{GPa}$



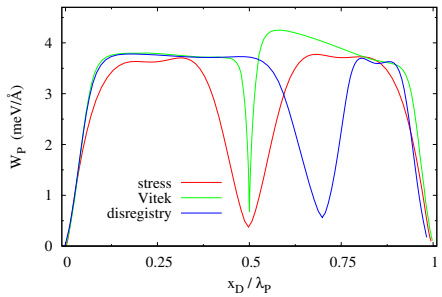
(e) 5643 atomes - $\tau = 0\,\mathrm{GPa}$

FIGURE C.3 – Position de la dislocation x_D projetée dans son plan de glissement $\{110\}$ en fonction de la coordonnée de réaction ζ le long de la barrière de Peierls d'une dislocation vis $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ dans le fer calculée pour différentes tailles de boîtes et pour différentes contraintes appliquées τ. La position de la dislocation a été déterminée à partir de la contrainte (stress), de la discontinuité de déplacement dans le plan de glissement $\{110\}$ (disregistry), ou de la carte des déplacements différentiels (Vitek). Les positions des dislocations sont normalisées par la distance entre vallées de Peierls λ_P.

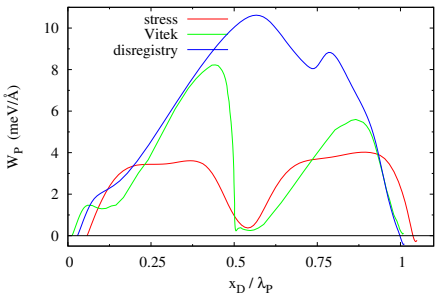
© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

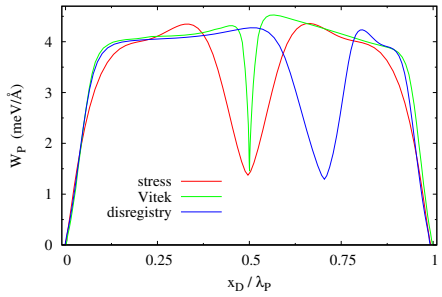
HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013



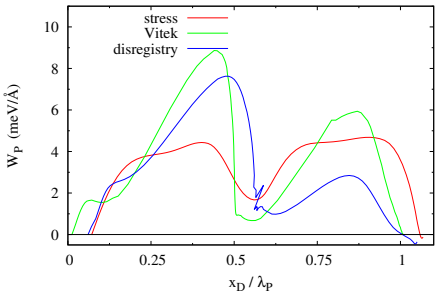
(a) 459 atomes - $\tau = 0\,\mathrm{GPa}$



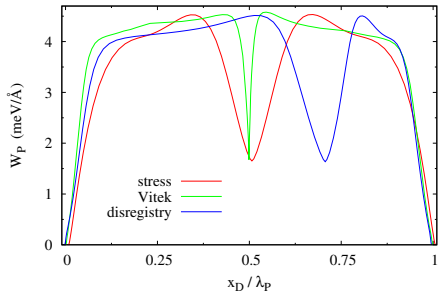
(b) 459 atomes - $\tau = 1\,\mathrm{GPa}$



(c) 1479 atomes - $\tau = 0\,\mathrm{GPa}$



(d) 1479 atomes - $\tau = 1\,\mathrm{GPa}$



(e) 5643 atomes - $\tau = 0\,\mathrm{GPa}$

FIGURE C.4 – Potentiel de Peierls d'une dislocation vis $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ dans le fer calculé pour différentes tailles de boîtes et pour différentes contraintes appliquées τ. La position de la dislocation a été déterminée à partir de la contrainte (stress), de la discontinuité de déplacement dans le plan de glissement $\{110\}$ (disregistry), ou de la carte des déplacements différentiels (Vitek).

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Pour $\tau = 1\,\text{GPa}$, les trois méthodes prédisent bien que les dislocations ont parcouru une vallée de Peierls entre l'état initial et l'état final. Par contre, ces deux états sont décalés par rapport au fond de la vallée de Peierls, ce décalage dépendant de la méthode.

Si nous traçons maintenant la variation d'énergie en fonction de la position de la dislocation, nous obtenons la figure C.4. Le potentiel de Peierls ainsi obtenu dépend fortement de la méthode choisie pour définir la position de la dislocation. Ceci est encore plus vrai lorsque la contrainte appliquée est non nulle. Le potentiel de Peierls obtenu avec une position déterminée à partir de l'ajustement de la discontinuité de déplacement ou de la carte de Vitek n'est pas correct car il n'est pas symétrique par rapport au milieu de la barrière. Par contre, le potentiel obtenu avec la position déterminée à partir de la contrainte semble correct. Le seul artefact qui subsiste dans ce cas avec une contrainte appliquée non nulle est que le minimum du potentiel de Peierls ne se situe pas en $x_\text{D} = 0$ et $x_\text{D} = \lambda_\text{P}$: il y a une translation, a priori non physique, du potentiel de Peielrs. Ceci est probablement dû au fait que toute la variation de la contrainte observée dans les boîtes de simulation ne provient pas uniquement d'un mouvement des dislocations. Il peut également y avoir une interaction entre le cœur des dislocations et la contrainte appliquée, du même type que la dilatation du cœur mise en évidence par calcul ab initio (chap. 4). Cette potentielle interaction, non prise en compte dans notre modèle, serait également source de contrainte.

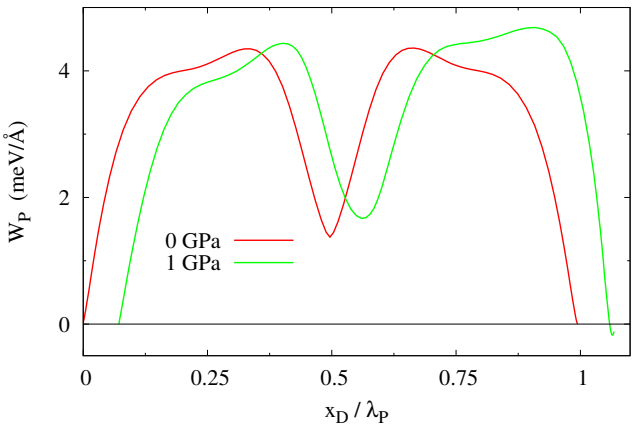


FIGURE C.5 – Potentiel de Peierls d'une dislocation vis $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ dans le fer pour différentes contraintes appliquées (1479 atomes).

Ne gardant plus que la méthode de la variation de la contrainte pour définir la position de la dislocation, nous pouvons voir comment le potentiel de Peierls varie avec la contrainte appliquée (Fig. C.5). Outre la translation

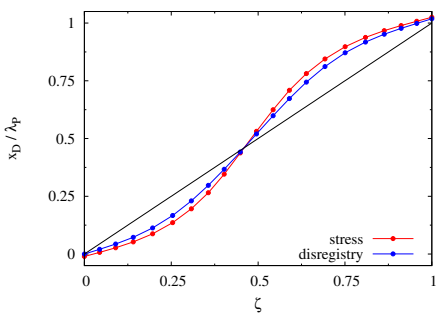
© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

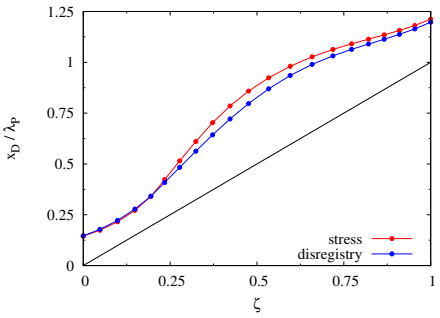
HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

du potentiel mentionnée précédemment, la forme du potentiel change sensiblement. Néanmoins, la pente maximale du potentiel reste la même, si bien que, quelque soit la contrainte appliquée, la même contrainte de Peierls sera déduite du potentiel de Peierls (Eq. 3.4).

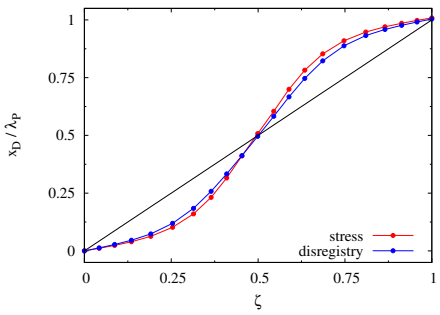
C.3 Dislocation mixte $[11\bar{1}]$



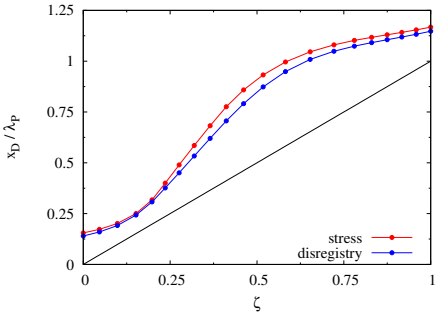
(a) 1560 atomes - $\tau = 0\,\mathrm{GPa}$



(b) 1560 atomes - $\tau = 0.4\,\mathrm{GPa}$



(c) 6696 atomes - $\tau = 0\,\mathrm{GPa}$



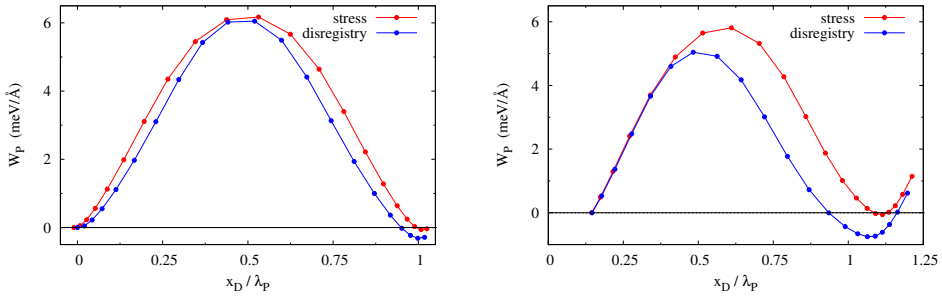
(d) 6696 atomes - $\tau = 0.4\,\mathrm{GPa}$

FIGURE C.6 – Position de la dislocation x_D projetée dans son plan de glissement $\{110\}$ en fonction de la coordonnée de réaction ζ le long de la barrière de Peierls d'une dislocation mixte $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ de vecteur ligne $[11\bar{1}]$ dans le fer calculée pour différentes tailles de boîtes et pour différentes contraintes appliquées τ. La position de la dislocation a été déterminée à partir de la contrainte (stress) ou de la discontinuité de déplacement dans le plan de glissement $\{110\}$ (disregistry). Les positions des dislocations sont normalisées par la distance entre vallées de Peierls λ_P.

Le même travail a été effectué avec la dislocation mixte d'orientation $[11\bar{1}]$ (Fig. C.6 et C.7). Là encore, le potentiel de Peierls obtenu, en particulier sa

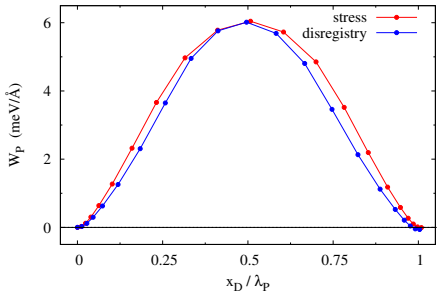
© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

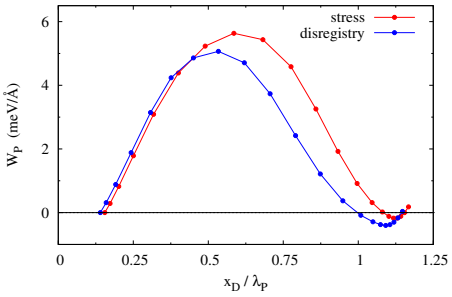


(a) 1560 atomes - $\tau = 0\,\mathrm{GPa}$

(b) 1560 atomes - $\tau = 0.4\,\mathrm{GPa}$



(c) 6696 atomes - $\tau = 0\,\mathrm{GPa}$



(d) 6696 atomes - $\tau = 0.4\,\mathrm{GPa}$

FIGURE C.7 – Potentiel de Peierls d'une dislocation mixte $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ de vecteur ligne $[11\bar{1}]$ dans le fer calculé pour différentes tailles de boîtes et pour différentes contraintes appliquées τ. La position de la dislocation a été déterminée à partir de la contrainte (stress) ou de la discontinuité de déplacement dans le plan de glissement $\{110\}$ (disregistry).

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

variation avec la contrainte appliquée, dépend de la méthode utilisée pour définir la position des dislocations. Les variations d'une méthode à l'autre sont néanmoins moins importante que pour la vis. Avec une contrainte appliquée non nulle, on observe également une translation du potentiel, ces minima ne se trouvant plus exactement en $x_\mathrm{D} = 0$ et $x_\mathrm{D} = \lambda_\mathrm{P}$.

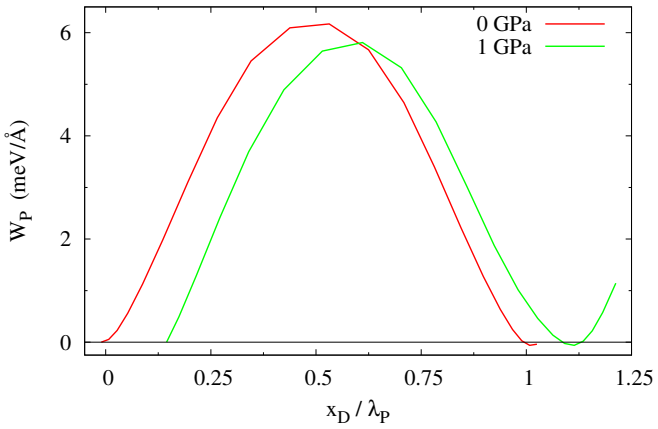


FIGURE C.8 – Potentiel de Peierls d'une dislocation mixte $1/2\langle 111\rangle\{110\}$ d'orientation $[11\bar{1}]$ dans le fer pour différentes contraintes appliquées (1479 atomes).

Gardant là encore les potentiels de Peierls obtenus avec une position de la dislocation déduite de la variation de contrainte, nous obtenons la figure C.8. Les conclusions sont les mêmes que pour la vis : une modification du potentiel, en particulier une translation, mais pas de variation de la pente maximale.

Cette annexe montre donc que la question de la variation du potentiel avec la contrainte appliquée est intimement liée à la méthode choisie pour extraire la position des dislocations des boîtes de simulation atomique. Ceci n'est pas spécifique aux conditions aux limites que nous utilisons, mais reste vrai pour tout type de conditions aux limites. En effet, dans tous les cas, il faut retrancher le travail des forces de Peach-Koehler ($-\tau b x_\mathrm{D}$) de la variation d'énergie obtenue par simulations atomiques. Une erreur sur la position x_D de la dislocation entraine donc une erreur sur la variation avec la contrainte appliquée du potentiel de Peierls. De toutes les méthodes que nous avons testées pour extraire les positions des dislocations, celle utilisant la variation de la contrainte semble la plus robuste, bien qu'un décalage sur la position

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

de la dislocation soit observée lorsqu'une contrainte est appliquée.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Annexe D

Défaut ponctuel en élasticité

Cette annexe a pour but de présenter succinctement le modèle de dipôle élastique utilisé pour représenter un défaut ponctuel en théorie élastique. Une présentation plus détaillée de ce modèle se trouve dans l'article de revue de Bacon *et al.* [28]. Nous montrons également l'équivalence de ce modèle de dipôle élastique avec le modèle d'inclusion d'Eshelby [98,99] lorsqu'une taille infinitésimale est considérée pour l'inclusion. Nous considérons tout d'abord le cas d'un défaut ponctuel non polarisable, c'est-à-dire dont les caractéristiques ne dépendent pas du champ élastique dans lequel il est plongé, puis nous introduisons la notion de polarisabilité correspondant à une inhomogénéité d'Eshelby.

D.1 Défaut ponctuel non polarisable

D.1.1 Dipôle élastique

On considère que le défaut ponctuel peut être représenté par une distribution de forces ponctuelles, soit N forces $\vec{F}^n$ agissant respectivement au point $\vec{a}^n$. Cette distribution doit être équilibrée, si bien que la résultante est nulle ($\sum_n \vec{F}^n = \vec{0}$), ainsi que le couple associé ($\sum_n \vec{F}^n \times \vec{a}^n = \vec{0}$). Le champ élastique créé par cette distribution de forces peut être obtenu grâce à la fonction de Green élastique du milieu, ainsi que ses dérivées. Cette fonction de Green $\mathbf{G}(\vec{r})$ permet d'obtenir le déplacement $\vec{u}(\vec{r})$ créé en un point $\vec{r}$ par une force ponctuelle $\vec{F}$ située à l'origine à travers la relation $u_i(\vec{r}) = G_{ij}(\vec{r})F_j$. Ainsi le déplacement créé par la distribution de force représentant le défaut ponctuel est donné par

$$u_i(\vec{r}) = \sum_n G_{ij}(\vec{r} - \vec{a}^n)F_j^n.$$

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Loin du défaut, *i.e.* pour $\|\vec{r}\| \gg \|\vec{a}^n\| \; \forall n$, un développement limité au premier ordre conduit à

$$u_i(\vec{r}) = \sum_n G_{ij}(\vec{r}) F_j^n - \sum_n G_{ij,k}(\vec{r}) a_k^n F_j^n,$$

où la notation avec une virgule $G_{ij,k}(\vec{r})$ désigne la dérivée par rapport à la coordonnée r_k de la fonction $G_{ij}(\vec{r})$. À cause de la propriété d'équilibre de la distribution de forces, le premier terme est nul, si bien qu'au final le déplacement est simplement donné par

$$u_i(\vec{r}) = -G_{ij,k}(\vec{r}) P_{jk}, \tag{D.1}$$

où le dipôle élastique P_{jk} correspond au premier moment de la distribution de forces, $P_{jk} = \sum_n a_k^n F_j^n$. Le champ de déformation et de contrainte créé à longue distance par le défaut ponctuel s'obtient ensuite simplement par dérivation de l'équation D.1

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}(\vec{r}) &= -\frac{1}{2} \left[G_{im,jn}(\vec{r}) + G_{jm,in}(\vec{r}) \right] P_{mn}, \\ \sigma_{ij}(\vec{r}) &= -C_{ijkl} G_{km,ln}(\vec{r}) P_{mn}. \end{aligned} \tag{D.2}$$

Par la suite, nous négligerons toujours les termes d'ordre supérieur, si bien que le champ élastique créé par le défaut sera simplement donné par les équations D.1 et D.2. Dans ce modèle, un défaut ponctuel est donc uniquement caractérisé par son dipôle élastique $\mathbf{P}$. Nous verrons un peu plus loin comment ce dipôle peut être déduit de nos simulations atomiques. Quant à la fonction de Green élastique et ses dérivées, elle s'obtient à partir des constantes élastiques du milieu. Des expressions analytiques sont disponibles en élasticité isotrope [4]. Pour un matériau anisotrope, elles peuvent être évaluées numériquement en utilisant la méthode de Barnett [9].

Ce modèle conduit à une expression simple de l'énergie d'interaction du défaut ponctuel avec un champ élastique extérieur. Ce champ extérieur peut être celui dû à un autre défaut par exemple. Quelque soit l'expression de ce champ extérieur, l'énergie d'interaction avec un défaut ponctuel caractérisé par le dipôle $\mathbf{P}$ est simplement donnée par [28]

$$E^{\text{inter}} = -P_{ij} \varepsilon_{ij}^{\text{a}}(\vec{0}) \tag{D.3}$$

où $\varepsilon^{\text{a}}(\vec{0})$ est la déformation créé par le champ extérieur à l'endroit où se trouve le défaut ponctuel.

La fonction de Green $\mathbf{G}(\vec{r})$ est homogène en $1/\|\vec{r}\|^2$ [28]. Les équations D.1 et D.2 montrent donc que le champ de déplacement et le champ de contrainte créés par un défaut ponctuel décroissent respectivement comme $1/r^2$ et $1/r^3$ avec la distance r au défaut.

Ce même modèle peut également être utilisé pour représenter le champ élastique d'un défaut linéaire, comme nous l'avons fait pour modéliser le

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

champ de cœur de la dislocation vis dans le fer (chap. 4). Les forces ponctuelles sont alors remplacées par des forces linéaires et on utilise la fonction de Green élastique pour un défaut linéaire [17, 28, 213].

D.1.2 Inclusion d'Eshelby

Le modèle d'inclusion d'Eshelby [98, 99] décrit le défaut ponctuel comme une inclusion de volume Ω, de mêmes constantes élastiques que la matrice, et subissant une déformation libre ε^{t} par rapport à la matrice. Eshelby montre alors que le champ de déplacement créé par l'inclusion est donné par

$$u_i(\vec{r}) = -\oiint_S G_{ij}(\vec{r}-\vec{x})\sigma^{\mathrm{t}}_{jk}(\vec{x})n_k \mathrm{d}S,$$

où l'intégration s'effectue sur la surface fermée définissant le volume Ω de l'inclusion et $\vec{n}$ est la normale à l'élément de surface $\mathrm{d}S$ situé en $\vec{x}$ et orientée vers l'extérieur de l'inclusion. La contrainte apparaissant dans cette expression est celle correspondant à la déformation libre, $\sigma^{\mathrm{t}}_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon^{\mathrm{t}}_{kl}$.

Si on fait l'hypothèse que la déformation libre de l'inclusion est homogène, un développement limité conduit à une expression simple du champ de déplacement créé par l'inclusion à longue distance :

$$u_i(\vec{r}) = -\Omega G_{ij,k}(\vec{r})\sigma^{\mathrm{t}}_{jk}. \tag{D.4}$$

Eshelby montre en outre que l'énergie d'interaction de l'inclusion avec un champ élastique extérieur de contrainte σ^{a}_{ij} est simplement donnée par

$$E^{\mathrm{inter}} = -\iiint_\Omega \sigma^{\mathrm{a}}_{ij}(\vec{x})\varepsilon^{\mathrm{t}}_{ij}(\vec{x})\mathrm{d}\Omega,$$

l'intégration s'effectuant sur le volume Ω de l'inclusion. Pour une inclusion infinitésimale, on peut supposer que le champ externe ne varie pas à l'intérieur de l'inclusion. Si on fait en outre l'hypothèse d'une déformation libre homogène, on aboutit à l'énergie d'interaction

$$E^{\mathrm{inter}} = -\Omega\sigma^{\mathrm{a}}_{ij}(\vec{0})\varepsilon^{\mathrm{t}}_{ij}, \tag{D.5}$$

où $\sigma^{\mathrm{a}}_{ij}(\vec{0})$ est la contrainte créé par le champ extérieur au niveau de l'inclusion.

La comparaison des équations D.1 et D.4, ainsi que D.3 et D.5, montre que la modélisation d'un défaut ponctuel avec un dipôle élastique est équivalente à une inclusion d'Eshelby infinitésimale sous la condition

$$P_{ij} = \Omega\sigma^{\mathrm{t}}_{ij} = \Omega C_{ijkl}\varepsilon^{\mathrm{t}}_{kl}. \tag{D.6}$$

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Inclusion ellipsoïdale

Pour une inclusion ellipsoïdale soumise à une déformation homogène ε^{t}, Eshelby montre en outre que la déformation élastique à l'intérieur de l'inclusion, ε^{c}, est homogène et dépend linéairement de la déformation propre :

$$\varepsilon^{\mathrm{c}}_{ij} = S^{\mathrm{E}}_{ijkl} \varepsilon^{\mathrm{t}}_{kl}. \tag{D.7}$$

Le tenseur d'Eshelby S^{E}_{ijkl} s'exprime à partir de la fonction de Green via

$$\begin{aligned} S^{\mathrm{E}}_{ijmn} =& \frac{1}{2} C_{klmn} \oiint_S \left[G_{ik,j}(\vec{x}) + G_{jk,i}(\vec{x}) \right] n_l(\vec{x}) \mathrm{d}S, \\ =& \frac{1}{2} C_{klmn} \iiint_\Omega \left[G_{ik,jl}(\vec{x}) + G_{jk,il}(\vec{x}) \right] \mathrm{d}V \end{aligned} \tag{D.8}$$

l'intégrale de la première ligne s'effectuant sur la surface de l'inclusion, avec $\vec{n}$ la normale extérieure à la surface, et celle de la seconde ligne sur le volume de l'inclusion. Ce tenseur de rang 4 obéit aux symétries mineures $S^{\mathrm{E}}_{ijmn} = S^{\mathrm{E}}_{jimn} = S^{\mathrm{E}}_{ijnm}$. Par contre, il ne respecte pas forcément la symétrie majeure : généralement $S^{\mathrm{E}}_{ijmn} \neq S^{\mathrm{E}}_{mnij}$.

L'énergie élastique totale due à la présence de l'inclusion est alors simplement donnée par

$$\begin{aligned} E =& -\frac{1}{2} \Omega C_{ijkl} \left(\varepsilon^{\mathrm{c}}_{ij} - \varepsilon^{\mathrm{t}}_{ij} \right) \varepsilon^{\mathrm{t}}_{kl} \\ =& -\frac{1}{2} \Omega C_{ijkl} \left(S^{\mathrm{E}}_{klmn} - \delta_{km}\delta_{ln} \right) \varepsilon^{\mathrm{t}}_{ij} \varepsilon^{\mathrm{t}}_{mn}. \end{aligned} \tag{D.9}$$

D.1.3 Obtention du dipôle élastique

Le dipôle élastique P_{ij} caractéristique d'un défaut ponctuel, ou de façon équivalente le produit $\Omega \varepsilon^{\mathrm{t}}_{ij}$, peut être obtenu simplement par simulation atomique. Pour cela, nous considérons une boîte de simulation tri-périodique ne contenant qu'un seul défaut ponctuel. Si cette boîte de simulation est soumise à une déformation homogène ε_{ij}, la théorie élastique, notamment l'équation D.3, prédit que la variation d'énergie est

$$\Delta E_\varepsilon = \frac{1}{2} V C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} - P_{ij} \varepsilon_{ij},$$

où V est le volume de la boîte de simulation. Pour une déformation homogène ε_{ij} fixée, la contrainte s'exerçant sur la boîte de simulation est donc

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V} \frac{\partial \Delta E_\varepsilon}{\partial \varepsilon_{ij}} = -\frac{1}{V} P_{ij} + C_{ijkl} \varepsilon_{kl}. \tag{D.10}$$

En particulier, si on n'impose pas de déformation homogène à la boîte de simulation ($\varepsilon_{ij} = 0$), la contrainte obtenue est proportionnelle au dipôle

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

élastique, le facteur de proportionnalité étant l'inverse du volume de la boîte de simulation. Si au contraire les vecteurs de périodicité sont relaxés afin d'annuler la contrainte ($\sigma_{ij} = 0$), cette même équation montre que ce sera la déformation subie par la boîte de simulation qui sera alors proportionnelle au dipôle élastique.

Nous avons utilisé cette méthode pour obtenir le dipôle élastique représentatif de différents défauts ponctuels [103, 110, 149]. D'autres méthodes numériques peuvent bien entendu être utilisés pour déterminer ce dipôle élastique à partir de simulations atomiques :

- un ajustement par le modèle élastique du champ de déplacement créé par le défaut ponctuel, tel qu'il est observé dans les simulations atomiques [214],
- un calcul à partir des forces de Kanzaki [215–218].

Cependant, la méthode liant le dipôle élastique à la contrainte et/ou la déformation homogène présente l'avantage d'être directe et simple d'emploi.

Comme nous le verrons ensuite, la polarisabilité du défaut ponctuel a pour conséquence que l'équation D.10 n'est plus vérifiée. Par conséquent, le dipôle élastique d'un défaut polarisable ne pourra plus, en théorie, être facilement déduit de la contrainte observée dans nos simulations atomiques.

D.2 Défaut ponctuel polarisable

D.2.1 Polarisabilité d'un dipôle élastique

L'application d'un champ élastique peut modifier les caractéristiques du défaut ponctuel. Ceci est pris en compte en introduisant un dipôle élastique dépendant de la déformation vue par le défaut ponctuel. Au premier ordre, le dipôle élastique modélisant le défaut sera donc donné par

$$P_{ij}(\varepsilon) = P^0_{ij} + P^1_{ijkl}\varepsilon_{kl}, \tag{D.11}$$

où P^0_{ij} est le dipôle élastique caractérisant le défaut ponctuel en l'absence de champ élastique appliqué et P^1_{ijkl} est la polarisabilité du défaut ponctuel. Par analogie avec l'électrostatique, Kröner [152] parle de para-élasticité pour le dipôle élastique permanent, et de dia-élasticité pour le dipôle élastique induit par le champ élastique.

Le déplacement à longue distance créé par le défaut ponctuel est toujours donné par l'équation D.1. Quand à l'énergie du défaut élastique en présence d'un champ externe, elle se composera non seulement d'un terme linéaire comme pour un défaut non polarisable (Eq. D.3) mais également d'un terme quadratique par rapport à la déformation imposée. En particulier, selon Schober [153], l'énergie d'interaction du défaut ponctuel, situé à l'origine, avec une un champ élastique est donnée par

$$E^{\text{inter}} = -P^0_{ij}\varepsilon^{\text{a}}_{ij}(\vec{0}) - \frac{1}{2}P^1_{ijkl}\varepsilon^{\text{a}}_{ij}(\vec{0})\varepsilon^{\text{a}}_{kl}(\vec{0}), \tag{D.12}$$

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

offrant ainsi une généralisation de l'équation D.3. Cette expression conduirait alors à la relation $\partial E^{\text{inter}}/\partial \varepsilon^{\text{a}}_{ij} = -P^0_{ij} - \frac{1}{2}(P^1_{ijkl} + P^1_{klij})\varepsilon^{\text{a}}_{kl}$. Ceci permettrait donc de déduire le dipôle élastique de la contrainte observée dans nos simulations atomiques (*cf.* §D.1.3), à condition que le tenseur de la polarisabilité respecte la symétrie majeure $P^1_{ijkl} = P^1_{klij}$.

Comme nous allons le voir, cette polarisabilité se retrouve dans le modèle d'inclusion d'Eshelby lorsque cette inclusion est supposée inhomogène, c'est-à-dire de constantes élastiques différentes de celles de la matrices. Par contre la polarisabilité que nous obtiendrons ne respectera pas la symétrie majeure énoncée précédemment. En outre, l'analogie avec le modèle d'inhomogénéité d'Eshelby nous montrera que la relation D.12 n'est pas exacte. L'énergie d'interaction du défaut ponctuel avec un champ externe fera bien intervenir un terme linéaire et un terme quadratique, mais le coefficient associé à la contribution linéaire diffèrera de $-P^0_{ij}$.

D.2.2 Inhomogénéité d'Eshelby

Eshelby a montré que les résultats obtenus pour une inclusion ellipsoïdale permettent par ailleurs de traiter le problème d'une inhomogénéité. On considère donc une inhomogénéité de forme ellipsoïdale, ayant des constantes élastiques C'_{ijkl} différentes des constantes C_{ijkl} de la matrice, et subissant une déformation propre $\varepsilon^{\text{t}\prime}$. Un champ extérieur correspondant à une déformation homogène ε^{a} est en outre appliqué. Le problème se résout en considérant une inclusion équivalente, de mêmes constantes élastiques que la matrice et subissant une déformation propre ε^{t}, conduisant au même champ élastique dans la matrice.

La continuité de la déformation à l'interface avec la matrice impose l'existence du même champ de déformation $\varepsilon^{\text{c}} + \varepsilon^{\text{a}}$ dans l'inhomogénéité et l'inclusion équivalente. La continuité de la contrainte impose, quant à elle, la relation

$$C'_{ijkl}\left(\varepsilon^{\text{c}}_{kl} - \varepsilon^{\text{t}\prime}_{kl} + \varepsilon^{\text{a}}_{kl}\right) = C_{ijkl}\left(\varepsilon^{\text{c}}_{kl} - \varepsilon^{\text{t}}_{kl} + \varepsilon^{\text{a}}_{kl}\right),$$

soit

$$C'_{ijkl}\left(S^{\text{E}}_{klmn}\varepsilon^{\text{t}}_{mn} - \varepsilon^{\text{t}\prime}_{kl} + \varepsilon^{\text{a}}_{kl}\right) = C_{ijkl}\left(S^{\text{E}}_{klmn}\varepsilon^{\text{t}}_{mn} - \varepsilon^{\text{t}}_{kl} + \varepsilon^{\text{a}}_{kl}\right),$$

conduisant donc à

$$\left[\left(C'_{ijkl} - C_{ijkl}\right) S^{\text{E}}_{klmn} + C_{ijmn}\right]\varepsilon^{\text{t}}_{mn} = C'_{ijkl}\varepsilon^{\text{t}\prime}_{kl} - \left(C'_{ijkl} - C_{ijkl}\right)\varepsilon^{\text{a}}_{kl}.$$

Cette expression permet d'obtenir la déformation propre ε^{t} de l'inclusion équivalente à partir de la déformation propre $\varepsilon^{\text{t}\prime}$ de l'inhomogénéité ainsi que de la déformation appliquée ε^{a}. En effet, Kuykendall *et al.* [219] ont prouvé que le tenseur apparaissant dans le membre de gauche était non singulier, si bien qu'au final il est possible d'écrire

$$\varepsilon^{\text{t}}_{mn} = A^{-1}_{mnij}\left[C'_{ijkl}\varepsilon^{\text{t}\prime}_{kl} - \left(C'_{ijkl} - C_{ijkl}\right)\varepsilon^{\text{a}}_{kl}\right], \tag{D.13}$$

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

où on a défini le tenseur $A_{ijmn} = \left(C'_{ijkl} - C_{ijkl}\right) S^{\mathrm{E}}_{klmn} + C_{ijmn}$.

Le champ élastique créé à longue distance par l'inclusion inhomogène est toujours donné par l'équation D.4. Ceci nous permet de voir que, dans la limite d'une inclusion infinitésimale, le dipôle permanent du défaut ponctuel (para-élastique) et sa polarisabilité (dia-élastique) sont respectivement donnés par

$$P^0_{ij} = \Omega C_{ijkl} A^{-1}_{klmn} C'_{mnop} \varepsilon^{\mathrm{t}\prime}_{op}, \tag{D.14a}$$

$$P^1_{ijop} = \Omega C_{ijkl} A^{-1}_{klmn} \left(C_{mnop} - C'_{mnop}\right). \tag{D.14b}$$

Ceci constitue, dans le cas d'un défaut ponctuel polarisable, une généralisation de l'équation D.6 décrivant l'équivalence entre un dipôle élastique et une inclusion d'Eshelby infinitésimale. Dans le cas d'une inclusion homogène, on retrouve bien que la polarisabilité est nulle et les équations D.6 et D.14 conduisent au même dipôle élastique.

À cause de la symétrie du tenseur des constante élastiques, le dipôle élastique est un tenseur symétrique : $P^0_{ij} = P^0_{ji}$. Pour la même raison, le tenseur de rang 4 donnant la polarisabilité obéit aux symétries mineures : $P^1_{ijkl} = P^1_{jikl} = P^1_{ijlk}$. Par contre, comme le tenseur d'Eshelby n'obéit pas forcément à la symétrie majeure (on peut avoir $S^{\mathrm{E}}_{ijkl} \neq S^{\mathrm{E}}_{klij}$), il en est de même pour la polarisabilité.

Énergie élastique

Pour obtenir l'énergie élastique due à la présence de l'inhomogénéité, on décompose l'énergie élastique totale entre énergie stockée dans l'inhomogénéité et énergie stockée dans la matrice.

La déformation dans l'inhomogénéité étant homogène, l'énergie élastique stockée dans cette inhomogénéité est simplement donnée par

$$E^{\mathrm{I}\prime} = \frac{1}{2} \Omega C'_{ijkl} \left(\varepsilon^{\mathrm{c}}_{ij} + \varepsilon^{\mathrm{a}}_{ij} - \varepsilon^{\mathrm{t}\prime}_{ij}\right) \left(\varepsilon^{\mathrm{c}}_{kl} + \varepsilon^{\mathrm{a}}_{kl} - \varepsilon^{\mathrm{t}\prime}_{kl}\right),$$

avec $\varepsilon^{\mathrm{c}}_{ij} = S^{\mathrm{E}}_{ijkl} \varepsilon^{\mathrm{t}}_{kl}$, la déformation propre ε^{t} de l'inclusion équivalente étant donnée par l'équation D.13.

L'énergie élastique stockée dans la matrice est la même que l'on considère l'inhomogénéité ou l'inclusion équivalente. En utilisant les résultats obtenus précédemment pour une inclusion, cette énergie s'écrit donc

$$\begin{aligned}
E^{\mathrm{M}} =& -\frac{1}{2} \Omega C_{ijkl} \left(\varepsilon^{\mathrm{c}}_{ij} - \varepsilon^{\mathrm{t}}_{ij}\right) \varepsilon^{\mathrm{t}}_{kl} - \Omega C_{ijkl} \varepsilon^{\mathrm{a}}_{ij} \varepsilon^{\mathrm{t}}_{kl} \\
& - \frac{1}{2} \Omega C_{ijkl} \left(\varepsilon^{\mathrm{c}}_{ij} + \varepsilon^{\mathrm{a}}_{ij} - \varepsilon^{\mathrm{t}}_{ij}\right) \left(\varepsilon^{\mathrm{c}}_{kl} + \varepsilon^{\mathrm{a}}_{kl} - \varepsilon^{\mathrm{t}}_{kl}\right), \\
=& -\frac{1}{2} \Omega C_{ijkl} \left(\varepsilon^{\mathrm{c}}_{ij} + \varepsilon^{\mathrm{a}}_{ij} - \varepsilon^{\mathrm{t}}_{ij}\right) \left(\varepsilon^{\mathrm{c}}_{kl} + \varepsilon^{\mathrm{a}}_{kl}\right) - \frac{1}{2} \Omega C_{ijkl} \varepsilon^{\mathrm{a}}_{ij} \varepsilon^{\mathrm{t}}_{kl}, \\
=& -\frac{1}{2} \Omega C'_{ijkl} \left(\varepsilon^{\mathrm{c}}_{ij} + \varepsilon^{\mathrm{a}}_{ij} - \varepsilon^{\mathrm{t}\prime}_{ij}\right) \left(\varepsilon^{\mathrm{c}}_{kl} + \varepsilon^{\mathrm{a}}_{kl}\right) - \frac{1}{2} \Omega C_{ijkl} \varepsilon^{\mathrm{a}}_{ij} \varepsilon^{\mathrm{t}}_{kl}.
\end{aligned}$$

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

Sur la première ligne, le premier terme correspond à l'énergie élastique totale de l'inclusion équivalente (Eq. D.9), le second terme à l'interaction de cette inclusion avec le champ externe (Eq. D.5), et le dernier terme à la part d'énergie stockée dans l'inclusion que l'on retranche de l'énergie totale. Le passage de la deuxième à la troisième ligne s'effectue en utilisant l'expression de continuité de la contrainte.

Au final, la somme de ces deux contributions énergétiques conduit à l'énergie élastique totale associée à la présence de l'inhomogénéité

$$\begin{aligned} E =& -\frac{1}{2}\Omega C'_{ijkl}\left(\varepsilon^{\mathrm{c}}_{ij}+\varepsilon^{\mathrm{a}}_{ij}-\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}_{ij}\right)\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}_{kl}-\frac{1}{2}\Omega C_{ijkl}\varepsilon^{\mathrm{a}}_{ij}\varepsilon^{\mathrm{t}}_{kl}. \\ =& -\frac{1}{2}\Omega C'_{ijkl}\left(S^{\mathrm{E}}_{ijmn}\varepsilon^{\mathrm{t}}_{mn}+\varepsilon^{\mathrm{a}}_{ij}-\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}_{ij}\right)\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}_{kl}-\frac{1}{2}\Omega C_{ijkl}\varepsilon^{\mathrm{a}}_{ij}\varepsilon^{\mathrm{t}}_{kl}. \end{aligned} \tag{D.15}$$

Dans le cas où les constantes élastiques sont homogènes, $\varepsilon^{\mathrm{t}} = \varepsilon^{\mathrm{t}\prime}$, on retrouve bien les expressions donnant l'énergie élastique d'une inclusion (Eq. D.9) et son énergie d'interaction avec un champ externe (Eq. D.5). [1]

En utilisant la notation de Voigt pour écrire les déformations sous forme de vecteurs de dimension 6 et les tenseurs de rang 4 sous forme de matrice 6×6, cette énergie s'écrit.

$$\begin{aligned} E =& -\frac{1}{2}\Omega\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}\mathbf{C}'\left\{\mathbf{S}^{\mathrm{E}}\mathbf{A}^{-1}\left[\mathbf{C}'\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}-\left(\mathbf{C}'-\mathbf{C}\right)\varepsilon^{\mathrm{a}}\right]+\varepsilon^{\mathrm{a}}-\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}\right\} \\ & -\frac{1}{2}\Omega\varepsilon^{\mathrm{a}}\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\left[\mathbf{C}'\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}-\left(\mathbf{C}'-\mathbf{C}\right)\varepsilon^{\mathrm{a}}\right] \\ =& -\frac{1}{2}\Omega\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}\mathbf{C}'\left\{\mathbf{S}^{\mathrm{E}}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}'-\mathbf{1}\right\}\varepsilon^{\mathrm{t}\prime} \\ & +\frac{1}{2}\Omega\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}\mathbf{C}'\left\{\mathbf{S}^{\mathrm{E}}\mathbf{A}^{-1}\left(\mathbf{C}'-\mathbf{C}\right)-\mathbf{1}-{}^{+}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}\right\}\varepsilon^{\mathrm{a}} \\ & +\frac{1}{2}\Omega\varepsilon^{\mathrm{a}}\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\left(\mathbf{C}'-\mathbf{C}\right)\varepsilon^{\mathrm{a}}, \end{aligned}$$

où ${}^{+}\mathbf{A}$ désigne la transposée de la matrice $\mathbf{A}$. Afin de voir si l'expression D.12 proposée par Schober [153] pour donner l'énergie d'interaction d'un défaut ponctuel polarisable avec un champ extérieur s'applique toujours dans le cas où le défaut ponctuel est assimilé à une inhomogénéité d'Eshelby, nous retranchons la contribution $-\varepsilon^{\mathrm{a}}P^0-\frac{1}{2}\varepsilon^{\mathrm{a}}\mathbf{P}^1\varepsilon^{\mathrm{a}}$ de cette énergie élastique en

1. L'expression générale est également donnée par Bullough et Willis (Eq. 6 dans la réf. 155). Dans le cas d'une inhomogénéité sans contrainte appliquée (ε^{a}), ou d'une inhomogénéité sans déformation propre ($\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}=0$), on retrouve les expressions données par Weinberger *et al.* (*cf.* Eq. 4.17 et 4.37 dans la référence 220)

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

utilisant les expressions D.14 pour le dipôle et la polarisabilité.

$$\begin{aligned} E + \varepsilon^{\mathrm{a}} P^0 + \frac{1}{2}\varepsilon^{\mathrm{a}}\mathbf{P}^1\varepsilon^{\mathrm{a}} &= -\frac{1}{2}\Omega\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}\mathbf{C}'\left\{\mathbf{S}^{\mathrm{E}}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}' - \mathbf{1}\right\}\varepsilon^{\mathrm{t}\prime} \\ &\quad + \frac{1}{2}\Omega\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}\mathbf{C}'\left\{\mathbf{S}^{\mathrm{E}}\mathbf{A}^{-1}\left(\mathbf{C}' - \mathbf{C}\right) - \mathbf{1} + {}^{+}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}\right\}\varepsilon^{\mathrm{a}} \\ &= -\frac{1}{2}\Omega\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}\mathbf{C}'\left\{\mathbf{S}^{\mathrm{E}}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}' - \mathbf{1}\right\}\varepsilon^{\mathrm{t}\prime} \\ &\quad + \frac{1}{2}\Omega\varepsilon^{\mathrm{t}\prime}\mathbf{C}'\left\{\mathbf{S}^{\mathrm{E}}\mathbf{A}^{-1} - {}^{+}\mathbf{A}^{-1}\,{}^{+}\mathbf{S}^{\mathrm{E}}\right\}\left(\mathbf{C}' - \mathbf{C}\right)\varepsilon^{\mathrm{a}}, \end{aligned}$$

où la passage de la première à la seconde ligne s'effectue grâce à la définition $\mathbf{A} = (\mathbf{C}' - \mathbf{C})\,\mathbf{S}^{\mathrm{E}} + \mathbf{C}$. La matrice $\mathbf{S}^{\mathrm{E}}\mathbf{A}^{-1}$ n'étant a priori pas symétrique, le terme apparaissant sur la dernière ligne n'est pas nul en général. On voit donc que l'énergie d'interaction ne se résume pas à la quantité $-\varepsilon^{\mathrm{a}}\mathbf{P}^0 - \frac{1}{2}\varepsilon^{\mathrm{a}}\mathbf{P}^1\varepsilon^{\mathrm{a}}$ comme l'avait supposé Schober [153]. À cause de la polarisabilité, un terme de couplage supplémentaire apparait. Une conséquence importante est que le dipôle total, $P(\varepsilon^{\mathrm{a}}) = P^0 + \mathbf{P}^1\varepsilon^{\mathrm{a}}$ n'est plus égal à la dérivée $-\partial E/\partial\varepsilon^{\mathrm{a}}$.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Annexe D

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

Bibliographie

[1] **Clouet E., Barbu A., Laé L. et Martin G.** *Precipitation kinetics of Al_3Zr and Al_3Sc in aluminum alloys modeled with cluster dynamics*. Acta Mater. **53** (2005), p. 2313.

[2] **Clouet E. et Barbu A.** *Using cluster dynamics to model electrical resistivity measurements in precipitating AlSc alloys*. Acta Mater. **55** (2007), p. 391.

[3] **Clouet E.** *Modeling of nucleation processes*. Dans *Fundamentals of Modeling for Metals Processing* (édité par **Furrer D.U. et Semiatin S.L.**) (ASM, 2009), vol. 22A de *ASM Handbook* p. 203–219.

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

[5] **Shenoy V.B. et Phillips R.** *Finite-sized atomistic simulations of screw dislocations*. Philos. Mag. A **76** (1997), p. 367.

[6] **Sinclair J.E., Gehlen P.C., Hoagland R.G. et Hirth J.P.** *Flexible boundary conditions and nonlinear geometric effects in atomic dislocation modeling*. J. Appl. Phys. **49** (1978), p. 3890.

[7] **Trinkle D.R.** *Lattice Green function for extended defect calculations : Computation and error estimation with long-range forces*. Phys. Rev. B **78** (2008), p. 014110.

[8] **Rao S., Hernandez C., Simmons J.P., Parthasarathy T.A. et Woodward C.** *Green's function boundary conditions in two-dimensional and three-dimensional atomistic simulations of dislocations*. Philos. Mag. A **77** (1998), p. 231.

[9] **Barnett D.M.** *The precise evaluation of derivatives of the anisotropic elastic Green's functions*. Phys. Status Solidi B **49** (1972), p. 741.

[10] **Woodward C. et Rao S.I.** *Flexible ab initio boundary conditions : Simulating isolated dislocations in bcc Mo and Ta*. Phys. Rev. Lett. **88** (2002), p. 216402.

[11] **Woodward C., Trinkle D.R., Hector, Jr. L.G. et Olmsted D.L.** *Prediction of dislocation cores in aluminum from density functional theory*. Phys. Rev. Lett. **100** (2008), p. 045507.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

[12] **Yu M., Trinkle D.R. et Martin R.M.** *Energy density in density functional theory : Application to crystalline defects and surfaces*. Phys. Rev. B **83** (2011).

[13] **Clouet E., Ventelon L. et Willaime F.** *Dislocation core energies and core fields from first principles*. Phys. Rev. Lett. **102** (2009), p. 055502.

[14] **Osetsky Y.N. et Bacon D.J.** *An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals*. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **11** (2003), p. 427.

[15] **Bacon D.J., Osetsky Y.N. et Rodney D.** *Dislocation-obstacle interactions at the atomic level*. Dans *Dislocations in Solids* (édité par **Hirth J.P. et Kubin L.**) (Elsevier, 2009), vol. 15 p. 1–90.

[16] **Stroh A.N.** *Dislocations and cracks in anisotropic elasticity*. Philos. Mag. **3** (1958), p. 625.

[17] **Stroh A.N.** *Steady state problems in anisotropic elasticity*. J. Math. Phys. (Cambridge, Mass.) **41** (1962), p. 77.

[18] **Cai W., Bulatov V.V., Chang J., Li J. et Yip S.** *Periodic image effects in dislocation modelling*. Philos. Mag. **83** (2003), p. 539.

[19] **Ventelon L. et Willaime F.** *Core structure and Peierls potential of screw dislocations in α-Fe from first principles : Cluster versus dipole approaches*. J. Computer-Aided Mater. Des. **14** (2007), p. 85.

[20] **Ventelon L.** *Simulation ab initio des cœurs de dislocation vis dans le fer*. Thèse de doctorat, Université Lyon I (2008).

[21] **Veiga R.G.A., Perez M., Becquart C.S., Domain C. et Garruchet S.** *Effect of the stress field of an edge dislocation on carbon diffusion in α-iron : Coupling molecular statics and atomistic kinetic monte carlo*. Phys. Rev. B **82** (2010), p. 054103.

[22] **Veiga R.G.A., Perez M., Becquart C.S., Clouet E. et Domain C.** *Comparison of atomistic and elasticity approaches for carbon diffusion near line defects in α-iron*. Acta Mater. **59** (2011), p. 6963.

[23] **Veiga R.G.A.** *Computational insights into the strain aging phenomenon in bcc iron at the atomic scale*. Thèse de doctorat, INSA Lyon (2011).

[24] **Crocombette J.P. et Gelebart L.** *Multiscale modeling of the thermal conductivity of polycrystalline silicon carbide*. J. Appl. Phys. **106** (2009), p. 083520.

[25] **Fossati P.** *Contribution à l'étude des propriétés mécaniques du combustible nucléaire : Modélisation atomistique de la déformation du dioxyde d'uranium*. Thèse de doctorat, École Centrale Paris (2012).

[26] **Clouet E.** *Elastic energy of a straight dislocation and contribution from core tractions*. Philos. Mag. **89** (2009), p. 1565.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

[27] **Bullough R. et Foreman E.A.J.** *The elastic energy of a rhombus-shaped dislocation loop*. Philos. Mag. **9** (1964), p. 315.

[28] **Bacon D.J., Barnett D.M. et Scattergood R.O.** *Anisotropic continuum theory of lattice defects*. Prog. Mater. Sci. **23** (1980), p. 51.

[29] **Lothe J. et Hirth J.P.** *Dislocation core parameters*. Phys. Status Solidi B **242** (2005), p. 836.

[30] **Lothe J.** *Dislocations in continuous elastic media*. Dans *Elastic Strain Fields and Dislocation Mobility* (édité par **Indenbom V.L. et Lothe J.**) (North-Holland, Amsterdam, 1992), vol. 31 de *Modern Problems in Condensed Matter Sciences* p. 187–235.

[31] **Li J., Wang C.Z., Chang J.P., Cai W., Bulatov V.V., Ho K.M. et Yip S.** *Core energy and peierls stress of a screw dislocation in bcc molybdenum : A periodic-cell tight-binding study*. Phys. Rev. B **70** (2004), p. 104113.

[32] **Bacon D.J., Bullough R. et Willis J.R.** *The anisotropic elastic energy of a rhombus-shaped dislocation loop*. Philos. Mag. **22** (1970), p. 31.

[33] **Gosling T.J. et Willis J.R.** *The energy of arrays of dislocations in an anisotropic half-space*. Philos. Mag. A **69** (1994), p. 65.

[34] **Gosling T.J.** *The stresses due to arrays of inclusions and dislocations of infinite length in an anisotropic half space : Application to strained semiconductor structures*. Philos. Mag. A **73** (1996), p. 11.

[35] **Dudarev S.L., Bullough R. et Derlet P.M.** *Effect of the $\alpha - \gamma$ phase transition on the stability of dislocation loops in bcc iron*. Phys. Rev. Lett. **100** (2008), p. 135503.

[36] **Mendelev M.I., Han S., Srolovitz D.J., Ackland G.J., Sun D.Y. et Asta M.** *Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron*. Philos. Mag. **83** (2003), p. 3977.

[37] **Clouet E.** *Screw dislocation in zirconium : An ab initio study*. Phys. Rev. B **86** (2012), p. 144104.

[38] **Mendelev M.I. et Ackland G.J.** *Development of an interatomic potential for the simulation of phase transformations in zirconium*. Philos. Mag. Lett. **87** (2007), p. 349.

[39] **Duesbery M.S.** *The dislocation core and plasticity*. Dans *Dislocations in Solids* (édité par **Nabarro F.R.N.**) (North Holland, 1989), vol. 8 p. 67–173.

[40] **Cai W., Bulatov V.V., Chang J., Li J. et Yip S.** *Dislocation core effects on mobility*. Dans *Dislocations in Solids* (édité par **Nabarro F.R.N. et Hirth J.P.**) (Elsevier, Amsterdam, 2005), vol. 12 p. 1–80.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

[41] **Vitek V. et Paidar V.** *Non-planar dislocation cores : A ubiquitous phenomenon affecting mechanical properties of crystalline materials*. Dans *Dislocations in Solids* (édité par **Hirth J.P.**) (Elsevier, 2008), vol. 14 p. 439–514.

[42] **Caillard D.** *Kinetics of dislocations in pure Fe. Part I. In situ straining experiments at room temperature*. Acta Mater. **58** (2010), p. 3493.

[43] **Seeger A. et Sesták B.** *Microstrain and dislocation relaxations in bcc metals*. Scripta Metall. **5** (1971), p. 875.

[44] **Seeger A. et Wüthrich C.** *Dislocation relaxation processes in body-centred cubic metals*. Il Nuovo Cimento B **33** (1976), p. 38.

[45] **Wüthrich V.C.** *The structure of kinks and constrictions of screw and 71° dislocations in b.c.c. metals*. Philos. Mag. **35** (1977), p. 325.

[46] **Wüthrich V.C.** *Energies of kinks and constrictions of screw and 71° dislocations in b.c.c. metals*. Philos. Mag. **35** (1977), p. 337.

[47] **Chang R. et Graham L.J.** *Edge dislocation core structure and the peierls barrier in body-centered cubic iron*. Phys. Status Solidi B **18** (1966), p. 99.

[48] **Yamaguchi M. et Vitek V.** *Core structure of nonscrew* $1/2\langle 111\rangle$ *dislocations on* $\{110\}$ *planes in b.c.c. crystals. i. core structure in an unstressed crystal*. J. Phys. F : Met. Phys. **3** (1973), p. 523.

[49] **Vitek V. et Yamaguchi M.** *Core structure of nonscrew* $1/2\langle 111\rangle$ *dislocations on* $\{110\}$ *planes in b.c.c. crystals. ii. peierls stress and the effect of an external shear stress on the cores*. J. Phys. F : Met. Phys. **3** (1973), p. 537.

[50] **Cai W.** *Atomistic and mesoscale modeling of dislocation mobility*. Thèse de doctorat, MIT, Cambridge, USA (2001).

[51] **Kang K., Bulatov V.V. et Cai W.** *Singular orientations and faceted motion of dislocations in body-centered cubic crystals*. Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. **109** (2012), p. 15174.

[52] **Schiffgens J. et Garrison K.** *Computer simulation studies of the* $a/2\langle 111\rangle$ *edge dislocation in* α*-iron*. J. Appl. Phys. **43** (1972), p. 3240.

[53] **Masuda K., Kobayashi K., Sato A. et Mori T.** *Calculation of core structure and core energy of* $1/2 < 111 > \{110\}$ *and* $1/2 < 111 > \{112\}$ *edge dislocations in a b.c.c. transition metal : Moments approach*. Philos. Mag. B **43** (1981), p. 19.

[54] **Duesbery M.S. et Xu W.** *The motion of edge dislocations in body-centered cubic metals*. Scripta Mater. **39** (1998), p. 283.

[55] **Liu X., Golubov S.I., Woo C.H. et Huang H.** *Glide of edge dislocations in tungsten and molybdenum*. Mater. Sci. Eng. A **365** (2004), p. 96.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

[56] **Chang J., Cai W., Bulatov V.V. et Yip S.** *Dislocation motion in bcc metals by molecular dynamics*. Mater. Sci. Eng. A **309-310** (2001), p. 160.

[57] **Chang J., Cai W., Bulatov V.V. et Yip S.** *Molecular dynamics simulations of motion of edge and screw dislocations in a metal*. Comp. Mater. Sci. **23** (2002), p. 111.

[58] **Yu S., Wang C.Y. et Yu T.** *The kink-pair nucleation in edge dislocation motion*. Solid State Sci. **11** (2009), p. 733.

[59] **Terentyev D., Bacon D.J. et Osetsky Y.N.** *Interaction of an edge dislocation with voids in α–iron modelled with different interatomic potentials*. J. Phys. : Condens. Matter **20** (2008), p. 445007.

[60] **Schäublin R. et Baluc N.** *Radiation damage in ferritic/martensitic steels for fusion reactors : a simulation point of view*. Nucl. Fusion **47** (2007), p. 1690.

[61] **Hafez Haghighat S. et Schäublin R.** *Influence of the stress field due to pressurized nanometric he bubbles on the mobility of an edge dislocation in iron*. Philos. Mag. **90** (2010), p. 1075.

[62] **Terentyev D., Haghighat S.M.H. et Schäublin R.** *Strengthening due to cr-rich precipitates in Fe–Cr alloys : Effect of temperature and precipitate composition*. J. Appl. Phys. **107** (2010), p. 061806.

[63] **Ackland G.J., Mendelev M.I., Srolovitz D.J., Han S. et Barashev A.V.** *Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α-iron*. J. Phys. : Condens. Matter **16** (2004), p. S2629.

[64] **Ackland G.J., Bacon D.J., Calder A.F. et Harry T.** *Computer simulation of point defect properties in dilute Fe–Cu alloy using a many-body interatomic potential*. Philos. Mag. A **75** (1997), p. 713.

[65] **Dudarev S.L. et Derlet P.M.** *A 'magnetic' interatomic potential for molecular dynamics simulations*. J. Phys. : Condens. Matter **17** (2005), p. 7097.

[66] **Ventelon L., Willaime F. et Leyronnas P.** *Atomistic simulation of single kinks of screw dislocations in α-fe*. J. Nucl. Mater. **386-388** (2009), p. 26.

[67] **Rao S.** *Communication privée* (2012).

[68] **Rodney D. et Proville L.** *Stress-dependent Peierls potential : Influence on kink-pair activation*. Phys. Rev. B **79** (2009), p. 094108.

[69] **Henkelman G., Jóhannesson G. et Jónsson H.** *Methods for finding saddle points and minimum energy paths : theoretical methods in condensed phase chemistry*. Dans *Progress in Theoretical Chemistry and Physics* (édité par **Schwartz S.D.**) (Springer Netherlands, 2000), vol. 5 p. 269–302.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

[70] **Peierls R.** *The size of a dislocation*. Proc. Phys. Soc. **52** (1940), p. 34.

[71] **Nabarro F.R.N.** *Dislocations in a simple cubic lattice*. Proc. Phys. Soc. **59** (1947), p. 256.

[72] **Ventelon L., Willaime F., Clouet E. et Rodney D.** *Ab initio investigation of the Peierls potential of screw dislocations in bcc Fe and W*. Acta Mater. **61** (2013), p. 3973.

[73] **Chaussidon J., Fivel M. et Rodney D.** *The glide of screw dislocations in bcc fe : Atomistic static and dynamic simulations*. Acta Mater. **54** (2006), p. 3407.

[74] **Kuramoto E., Aono Y. et Kitajima K.** *Thermally activated slip deformation of high purity iron single crystals between 4.2 K and 300 K*. Scripta Metall. **13** (1979), p. 1039.

[75] **Caillard D.** *Kinetics of dislocations in pure Fe. Part II. In situ straining experiments at low temperature*. Acta Mater. **58** (2010), p. 3504.

[76] **Proville L., Rodney D. et Marinica M.C.** *Quantum effect on thermally activated glide of dislocations*. Nat. Mater. **11** (2012), p. 845.

[77] **Woodward C. et Rao S.I.** *Ab-initio simulation of isolated screw dislocations in bcc Mo and Ta*. Philos. Mag. A **81** (2001), p. 1305.

[78] **Dorn J.E. et Rajnak S.** *Nucleation of kink pairs and the Peierls' mechanism of plastic deformation*. Trans. AIME **230** (1964), p. 1052.

[79] **Guyot P. et Dorn J.E.** *A critical review of the Peierls mechanism*. Can. J. Phys. **45** (1967), p. 983.

[80] **Rodney D.** *Activation enthalpy for kink-pair nucleation on dislocations : Comparison between static and dynamic atomic-scale simulations*. Phys. Rev. B **76** (2007), p. 144108.

[81] **Proville L., Ventelon L. et Rodney D.** *Prediction of the kink-pair formation enthalpy on screw dislocations in α-iron by a line tension model parametrized on empirical potentials and first-principles calculations*. Phys. Rev. B **87** (2013).

[82] **Gröger R. et Vitek V.** *Multiscale modeling of plastic deformation of molybdenum and tungsten. III. Effects of temperature and plastic strain rate*. Acta Mater. **56** (2008), p. 5426.

[83] **Edagawa K., Suzuki T. et Takeuchi S.** *Motion of a screw dislocation in a two-dimensional Peierls potential*. Phys. Rev. B **55** (1997), p. 6180.

[84] **Edagawa K., Suzuki T. et Takeuchi S.** *Plastic anisotropy in b.c.c. transition metals*. Mater. Sci. Eng. A **234**–**236** (1997), p. 1103.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

[85] **Itakura M., Kaburaki H. et Yamaguchi M.** *First-principles study on the mobility of screw dislocations in bcc iron*. Acta Mater. **60** (2012), p. 3698.

[86] **Gröger R. et Vitek V.** *Constrained nudged elastic band calculation of the peierls barrier with atomic relaxations*. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **20** (2012), p. 035019.

[87] **Ismail-Beigi S. et Arias T.A.** *Ab initio study of screw dislocations in Mo and Ta : A new picture of plasticity*. Phys. Rev. Lett. **84** (2000), p. 1499.

[88] **Frederiksen S.L. et Jacobsen K.W.** *Density functional theory studies of screw dislocation core structures in bcc metals*. Philos. Mag. **83** (2003), p. 365.

[89] **Eshelby J.D., Read W.T. et Shockley W.** *Anisotropic elasticity with applications to dislocation theory*. Acta Metall. **1** (1953), p. 251.

[90] **Gehlen P.C., Hirth J.P., Hoagland R.G. et Kanninen M.F.** *A new representation of the strain field associated with the cube-edge dislocation in a model of a α-iron*. J. Appl. Phys. **43** (1972), p. 3921.

[91] **Hirth J.P. et Lothe J.** *Anisotropic elastic solutions for line defects in high-symmetry cases*. J. Appl. Phys. **44** (1973), p. 1029.

[92] **Hoagland R.G., Hirth J.P. et Gehlen P.C.** *Atomic simulation of the dislocation core structure and peierls stress in alkali halide*. Philos. Mag. **34** (1976), p. 413.

[93] **Henager C.H. et Hoagland R.G.** *Dislocation core fields and forces in fcc metals*. Scripta Mater. **50** (2004), p. 1091.

[94] **Henager C.H. et Hoagland R.G.** *Dislocation and stacking fault core fields in fcc metals*. Philos. Mag. **85** (2005), p. 4477.

[95] **Leibfried G. et Breuer N.** *Point Defects in Metals I*, vol. 81 de *Springer Tracts in Modern Physics* (Springer-Verlag, Berlin, 1978).

[96] **Teodosiu C.** *Elastic Models of Crystal Defects* (Springer-Verlag, Berlin, 1982).

[97] **Balluffi R.W.** *Introduction to Elasticity Theory for Crystal Defects* (Cambridge University Press, 2012).

[98] **Eshelby J.D.** *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems*. Proc. Roy. Soc. Lond. A **241** (1957), p. 376.

[99] **Eshelby J.D.** *The elastic field outside an ellipsoidal inclusion*. Proc. Roy. Soc. Lond. A **252** (1959), p. 561.

[100] **Hirth J.P.** *Anisotropic elastic solutions for line force arrays*. Scripta Metall. **6** (1972), p. 535.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

[101] **Kuan H. et Hirth J.P.** *Dislocation pileups near the interface of a bimaterial couple*. Mater. Sci. Eng. **22** (1976), p. 113.

[102] **Clouet E.** *Dislocation core field. I. Modeling in anisotropic linear elasticity theory*. Phys. Rev. B **84** (2011), p. 224111.

[103] **Clouet E., Ventelon L. et Willaime F.** *Dislocation core field. II. Screw dislocation in iron*. Phys. Rev. B **84** (2011), p. 224107.

[104] **Seeger A. et Haasen P.** *Density changes of crystals containing dislocations*. Philos. Mag. **3** (1958), p. 470.

[105] **Willis J.R.** *Second-order effects of dislocations in anisotropic crystals*. Int. J. Eng. Sci. **5** (1967), p. 171.

[106] **Crussard C. et Aubertin F.** *Nouvelle méthode de précision pour la mesure de la maille individuelle des grains. application à l'étude de l'écrouissage et de la recristallisation.*. Rev. Met. Paris **46** (1949), p. 354.

[107] **Hirth J.P.** *Dislocation-pressure interactions*. Dans *Handbook of materials modeling* (édité par **Yip S.**) (Springer, The Netherlands, 2005) p. 2879–2882.

[108] **Hirth J.P.** *Crack nucleation in glide plane decohesion and shear band separation*. Scripta Metall. Mater. **28** (1993), p. 703.

[109] **Fleischer R.L.** *Substitutional solution hardening*. Acta Metall. **11** (1963), p. 203.

[110] **Varvenne C., Bruneval F., Marinica M.C. et Clouet E.** *Point defect modeling in materials : coupling ab initio and elasticity approaches*. Phys. Rev. B **88** (2013), p. 134102.

[111] **Bailey J.** *Electron microscope studies of dislocations in deformed zirconium*. J. Nucl. Mater. **7** (1962), p. 300.

[112] **Akhtar A. et Teghtsoonian A.** *Plastic deformation of zirconium single crystals*. Acta Metall. **19** (1971), p. 655.

[113] **Ferrer F., Barbu A., Bretheau T., Crépin J., Willaime F. et Charquet D.** *The effect of small concentrations of sulfur on the plasticity of zirconium alloys at intermediate temperatures*. Dans *Zirconium in the nuclear industry : thirteenth international symposium* (édité par **Moan G.D. et Rudling P.**) (American Society Testing and Materials, W Conshohocken, USA, 2002), vol. 1423 de *American Society for Testing and Materials Special Technical Publication* p. 863–885. 13th International Symposium on Zirconium in the Nuclear Industry, Annecy, France, June 10-14, 2001.

[114] **Naka S., Lasalmonie A., Costa P. et Kubin L.P.** *The low-temperature plastic deformation of α titanium and the core structure of a-type screw dislocations*. Philos. Mag. A **57** (1988), p. 717.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

[115] **Farenc S., Caillard D. et Couret A.** *An in situ study of prismatic glide in α titanium at low temperatures*. Acta Metall. Mater. **41** (1993), p. 2701 .

[116] **Farenc S., Caillard D. et Couret A.** *A new model for the peak of activation area of α titanium*. Acta Metall. Mater. **43** (1995), p. 3669 .

[117] **Mills D. et Craig G.B.** *The plastic deformation of zirconium-oxygen alloy single crystals in the range 77 to 950 K*. Trans. AIME **242** (1968), p. 1881.

[118] **Soo P. et Higgins G.T.** *The deformation of zirconium-oxygen single crystals*. Acta Metall. **16** (1968), p. 177.

[119] **Sastry D.H., Prasad Y.V.R.K. et Vasu K.I.** *An evaluation of rate-controlling obstacles for low-temperature deformation of zirconium*. J. Mater. Sci. **6** (1971), p. 332.

[120] **Sastry D. et Vasu K.** *Dislocation dynamics in alpha titanium*. Acta Metall. **20** (1972), p. 399 .

[121] **Tanaka T. et Conrad H.** *Deformation kinetics for* $\{10\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0\rangle$ *slip in titanium single crystals below* $0.4T_m$. Acta Metall. **20** (1972), p. 1019 .

[122] **Akhtar A. et Teghtsoonian E.** *Prismatic slip in α-titanium single crystals*. Metall. Mater. Trans. A **6** (1975), p. 2201.

[123] **Legrand B.** *Relations entre la structure électronique et la facilité de glissement dans les métaux hexagonaux compacts*. Philos. Mag. B **49** (1984), p. 171.

[124] **Legrand B.** *Structure du cœur des dislocations vis* $1/3\langle 11\bar{2}0\rangle$ *dans le titane*. Philos. Mag. A **52** (1985), p. 83.

[125] **Girshick A., Pettifor D.G. et Vitek V.** *Atomistic simulation of titanium II. Structure of* $1/3\langle 1\bar{2}10\rangle$ *screw dislocations and slip systems in titanium*. Philos. Mag. A **77** (1998), p. 999.

[126] **Domain C. et Legris A.** *Atomic scale simulation of the effect of hydrogen on dislocations in Zr*. Dans *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* (2000), vol. 653 p. Z3.8.

[127] **Domain C.** *Ab initio modelling of defect properties with substitutional and interstitials elements in steels and Zr alloys*. J. Nucl. Mater. **351** (2006), p. 1.

[128] **Tarrat N., Benoit M. et Morillo J.** *Core structure of screw dislocations in hcp Ti : an ab initio DFT study*. Int. J. Mater. Res. **100** (2009), p. 329.

[129] **Ghazisaeidi M. et Trinkle D.** *Core structure of a screw dislocation in Ti from density functional theory and classical potentials*. Acta Mater. **60** (2012), p. 1287.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

[130] **Khater H.A. et Bacon D.J.** *Dislocation core structure and dynamics in two atomic models of alpha-zirconium*. Acta Mater. **58** (2010), p. 2978.

[131] **Vitek V.** *Intrinsic stacking faults in body-centred cubic crystals*. Philos. Mag. **18** (1968), p. 773.

[132] **Domain C., Besson R. et Legris A.** *Atomic-scale ab initio study of the Zr-H system : II. Interaction of h with plane defects and mechanical properties*. Acta Mater. **52** (2004), p. 1495.

[133] **Udagawa Y., Yamaguchi M., Abe H., Sekimura N. et Fuketa T.** *Ab initio study on plane defects in zirconium-hydrogen solid solution and zirconium hydride*. Acta Mater. **58** (2010), p. 3927.

[134] **Hull D. et Bacon D.J.** *Introduction to Dislocations* (Butterworth-Heinemann, Oxford, UK, 2011), 5^{th} edition édition.

[135] **Bacon D. et Vitek V.** *Atomic-scale modeling of dislocations and related properties in the hexagonal-close-packed metals*. Metall. Mater. Trans. A **33** (2002), p. 721.

[136] **Schwartzkopff K.** *Metastable stacking sequences in hexagonal metals*. Acta Metall. **17** (1969), p. 345.

[137] **Vitek V., Perrin R.C. et Bowen D.K.** *The core structure of* $1/2\langle 111\rangle$ *screw dislocations in b.c.c. crystals*. Philos. Mag. **21** (1970), p. 1049.

[138] **Rapperport K.E.J. et Hartley C.S.** *Deformation modes of zirconium at 77°, 575°, and 1075°K*. Trans. AIME **218** (1960), p. 869.

[139] **Naka S.** *Étude des mécanismes de déformation plastique a basse température de monocristaux de titane* α. Thèse de doctorat, Univ. Paris-Sud (1983).

[140] **Rosi F.D., Dube C.A. et Alexander B.H.** *Mechanism of plastic flow in titanium - determination of slip and twinning elements*. Trans. AIME **197** (1953), p. 257.

[141] **Churchman A.T.** *The slip modes of titanium and the effect of purity on their occurrence during tensile deformation of single crystals*. Proc. R. Soc. Lond. A **226** (1954), p. 216.

[142] **Shechtman D. et Brandon D.G.** *Orientation dependent slip in polycrystalline titanium*. J. Mater. Sci. **8** (1973), p. 1233.

[143] **Naka S. et Lasalmonie A.** *Cross-slip on the first order pyramidal plane* $(10\bar{1}1)$ *of a-type dislocations* $[1\bar{2}10]$ *in the plastic deformation of* α*-titanium single crystals*. J. Mater. Sci. **18** (1983), p. 2613.

[144] **Rautenberg M., Feaugas X., Poquillon D. et Cloué J.M.** *Microstructural characterization of creep anisotropy at 673K in the M5(R) alloy*. Acta Mater. **60** (2012), p. 4319.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

[145] **Baldwin D.H. et Reedhill R.E.** *Some effects of oxygen on tensile deformation of polycrystalline zirconium*. Trans. AIME **242** (1968), p. 661.

[146] **Akhtar A.** *Basal slip in zirconium*. Acta Metall. **21** (1973), p. 1.

[147] **Yoo M.** *Slip, twinning, and fracture in hexagonal close-packed metals*. Metall. Trans. A **12** (1981), p. 409.

[148] **Clouet E.** *The vacancy - edge dislocation interaction in fcc metals : a comparison between atomic simulations and elasticity theory*. Acta Mater. **54** (2006), p. 3543.

[149] **Clouet E., Garruchet S., Nguyen H., Perez M. et Becquart C.S.** *Dislocation interaction with C in α-Fe : a comparison between atomic simulations and elasticity theory*. Acta Mater. **56** (2008), p. 3450.

[150] **Cottrell A.H. et Bilby B.A.** *Distribution of solute atoms around a slow dislocation*. Proc. Phys. Soc. London Ser. A **62** (1949), p. 49.

[151] **Dederichs P., Lehmann C., Schober H., Scholz A. et Zeller R.** *Lattice theory of point defects*. J. Nucl. Mater. **69-70** (1978), p. 176.

[152] **Kröner E.** *Dia- and para-elasticity*. Dans *Theory of crystal defects* (édité par **Kroupa F.**) (Academia, 1964) p. 215–230.

[153] **Schober H.R.** *Polarizabilities of point defects in metals*. J. Nucl. Mater. **126** (1984), p. 220.

[154] **Bullough R. et Newman R.C.** *The kinetics of migration of point defects to dislocations*. Rep. Prog. Phys. **33** (1970), p. 101.

[155] **Bullough T. et Willis J.R.** *The stress-induced point defect-dislocation interaction and its relevance to irradiation creep*. Philos. Mag. **31** (1975), p. 855.

[156] **Mordehai D. et Martin G.** *Enhanced annealing of the dislocation network under irradiation*. Phys. Rev. B **84** (2011), p. 014115.

[157] **Ackland G.J.** *Theoretical study of the effect of point defects on the elastic constants of copper*. J. Nucl. Mater. **152** (1988), p. 53.

[158] **Puls M.P. et Woo C.H.** *Diaelastic polarizabilities due to vacancies and interstitials in metals*. J. Nucl. Mater. **139** (1986), p. 48.

[159] **Ercolessi F. et Adams J.B.** *Interatomic potentials from first-principles calculations : the force-matching method*. Europhys. Lett. **26** (1994), p. 583.

[160] **Medlin D.L., Foiles S.M. et Cohen D.** *A dislocation-based description of grain boundary dissociation : Application to a 90° ⟨110⟩ tilt boundary in gold*. Acta Mater. **49** (2001), p. 3689.

[161] **Mishin Y., Mehl M.J., Papaconstantopoulos D.A., Voter A.F. et Kress J.D.** *Structural stability and lattice defects in copper : Ab*

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

initio, tight-binding, and embedded-atom calculations. Phys. Rev. B **63** (2001), p. 224106.

[162] **Angelo J.E., Moody N.R. et Baskes M.I.** *Trapping of hydrogen to lattice defects in nickel*. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **3** (1995), p. 289.

[163] **Patinet S.** *Substitutional Al solute interaction with edge and screw dislocation in Ni : a comparison between atomistic computation and continuum elastic theory*. Dans *Multiscale Materials Modeling conference* (Tallahassee, 2008) .

[164] **Patinet S.** *Durcissement par solution solide dans les alliages métalliques cubiques à faces centrées - Étude par simulation à l'Échelle atomique du glissement des dislocations en solutions solides*. Thèse de doctorat, Paris Sud XI (Orsay) (2009).

[165] **Chen Z.M., Mrovec M. et Gumbsch P.** *Dislocation–vacancy interactions in tungsten*. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **19** (2011), p. 074002.

[166] **Becquart C.S., Raulot J.M., Bencteux G., Domain C., Perez M., Garruchet S. et Nguyen H.** *Atomistic modeling of an fe system with a small concentration of c*. Comp. Mater. Sci. **40** (2007), p. 119.

[167] **Subramanian G., Perez D., Uberuaga B.P., Tomé C.N. et Voter A.F.** *Method to account for arbitrary strains in kinetic Monte carlo simulations*. Phys. Rev. B **87** (2013), p. 144107.

[168] **Chen Q., Liu X.Y. et Biner S.** *Solute and dislocation junction interactions*. Acta Mater. **56** (2008), p. 2937.

[169] **Wolfer W.G.** *The dislocation bias*. J. Computer-Aided Mater. Des. **14** (2007), p. 403.

[170] **Hirsch P.B.** *Extended jogs in dislocations in face-centred cubic metals*. Philos. Mag. **7** (1962), p. 67.

[171] **Thompson N.** *Dislocation nodes in face-centred cubic lattices*. Proc. Phys. Soc. B **66** (1953), p. 481.

[172] **Rodney D. et Martin G.** *Dislocation pinning by glissile interstitial loops in a nickel crystal : A molecular-dynamics study*. Phys. Rev. B **61** (2000), p. 8714.

[173] **Rodney D. et Bonneville J.** *Dislocations*. Dans *Physical Metallurgy* (édité par **Laughlin D. et Hono K.**) (Elsevier, 2014) .

[174] **Mordehai D., Clouet E., Fivel M. et Verdier M.** *Introducing dislocation climb by bulk diffusion in discrete dislocation dynamics*. Philos. Mag. **88** (2008), p. 899.

[175] **Bakó B., Clouet E., Dupuy L.M. et Blétry M.** *Dislocation dynamics simulations with climb : Kinetics of dislocation loop coarsening controlled by bulk diffusion*. Philos. Mag. **91** (2011), p. 3173.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

[176] **Keralavarma S., Cagin T., Arsenlis A. et Benzerga A.** *Power-law creep from discrete dislocation dynamics*. Phys. Rev. Lett. **109** (2012), p. 265504.

[177] **Lebensohn R.A., Hartley C.S., Tomé C.N. et Castelnau O.** *Modeling the mechanical response of polycrystals deforming by climb and glide*. Philos. Mag. **90** (2010), p. 567.

[178] **Kabir M., Lau T.T., Rodney D., Yip S. et Van Vliet K.J.** *Predicting dislocation climb and creep from explicit atomistic details*. Phys. Rev. Lett. **105** (2010), p. 095501.

[179] **Friedel J.** *Dislocations* (Pergamon Press, Oxford, 1964).

[180] **Turunen M.J.** *A general equation of motion for dislocation climb*. Acta Metall. **24** (1976), p. 463.

[181] **Weertman J.** *The Peach-Koehler equation for the force on a dislocation modified for hydrostatic pressure*. Philos. Mag. **11** (1965), p. 1217.

[182] **Lothe J. et Hirth J.P.** *Dislocation climb forces*. J. Appl. Phys. **38** (1967), p. 845.

[183] **Heald P.T. et Speight M.V.** *Point defect behaviour in irradiated materials*. Acta Metall. **23** (1975), p. 1389.

[184] **Clouet E.** *Predicting dislocation climb : Classical modeling versus atomistic simulations*. Phys. Rev. B **84** (2011), p. 092106.

[185] **Thomson R.M. et Balluffi R.W.** *Kinetic theory of dislocation climb. I. General models for edge and screw dislocations*. J. Appl. Phys. **33** (1962), p. 803.

[186] **Balluffi R.W. et Thomson R.M.** *Kinetic theory of dislocation climb. II. Steady state edge dislocation climb*. J. Appl. Phys. **33** (1962), p. 817.

[187] **Caillard D. et Martin J.L.** *Thermally activated mechanisms in crystal plasticity* (Pergamon, Amsterdam, 2003).

[188] **Poirier J.P.** *Creep of Crystals : High-Temperature Deformation Processes in Metals, Ceramics and Minerals* (Cambridge University Press, 1985).

[189] **Humphreys F.J. et Hatherly M.** *Recrystallization and Related Annealing Phenomena* (Pergamon, 2004), 2nd édition.

[190] **Bakó B. et Hoffelner W.** *Cellular dislocation patterning during plastic deformation*. Phys. Rev. B **76** (2007).

[191] **Bakó B., Groma I., Györgyi G. et Zimányi G.** *Dislocation glasses : aging during relaxation and coarsening*. Phys. Rev. Lett. **98** (2007).

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

[192] **Verdier M., Fivel M. et Groma I.** *Mesoscopic scale simulation of dislocation dynamics in fcc metals : Principles and applications*. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **6** (1998), p. 755.

[193] **Roters F., Raabe D. et Gottstein G.** *Calculation of stress–strain curves by using 2 dimensional dislocation dynamics*. Comp. Mater. Sci. **7** (1996), p. 56.

[194] **Ghoniem N.M., Tong S.H. et Sun L.Z.** *Parametric dislocation dynamics : A thermodynamics-based approach to investigations of mesoscopic plastic deformation*. Phys. Rev. B **61** (2000), p. 913.

[195] **Cai W. et Bulatov V.V.** *Mobility laws in dislocation dynamics simulations*. Mater. Sci. Eng. A **387-389** (2004), p. 277.

[196] **Xiang Y. et Srolovitz D.J.** *Dislocation climb effects on particle bypass mechanisms*. Philos. Mag. **86** (2006), p. 3937.

[197] **Chen Z., Chu K.T., Srolovitz D.J., Rickman J.M. et Haataja M.P.** *Dislocation climb strengthening in systems with immobile obstacles : Three-dimensional level-set simulation study*. Phys. Rev. B **81** (2010), p. 054104.

[198] **Mordehai D., Clouet E., Fivel M. et Verdier M.** *Annealing of dislocation loops in dislocation dynamics simulations*. IOP Conf. Series : Mater. Sci. Eng. **3** (2009), p. 012001. Dislocation 2008 Conference.

[199] **Kirchner H.O.K.** *Size distribution of dislocation loops*. Acta Metall. **21** (1973), p. 85.

[200] **Burton B. et Speight M.V.** *The coarsening and annihilation kinetics of dislocation loop*. Philos. Mag. A **53** (1986), p. 385.

[201] **Lifshitz I.M. et Slyozov V.V.** *The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions*. J. Phys. Chem. Solids **19** (1961), p. 35.

[202] **Wagner C.** *Theorie der alterung von niederschlägen durch umlösen*. Z. Elektrochem. **65** (1961), p. 581.

[203] **Love G.R.** *Dislocation pipe diffusion*. Acta Metall. **12** (1964), p. 731.

[204] **Legros M., Dehm G., Arzt E. et Balk T.J.** *Observation of giant diffusivity along dislocation cores*. Science **319** (2008), p. 1646.

[205] **Turunen M.J. et Lindroos V.K.** *Model for dislocation climb by a pipe diffusion mechanism*. Philos. Mag. **29** (1974), p. 701.

[206] **Turunen M.J.** *Simulation of dislocation movements by a computer technique*. Philos. Mag. **30** (1974), p. 1033.

[207] **Philippe M.J., Esling C. et Hocheid B.** *Role of twinning in texture development and in plastic deformation of hexagonal materials*. Textures and Microstructures **7** (1988), p. 265.

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

[208] **Cai W., Arsenlis A., Weinberger C.R. et Bulatov V.V.** *A non-singular continuum theory of dislocations*. J. Mech. Phys. Solids **54** (2006), p. 561.

[209] **Foreman A.J.E.** *The bowing of a dislocation segment*. Philos. Mag. **15** (1967), p. 1011.

[210] **Scattergood R.O. et Bacon D.J.** *The Orowan mechanism in anisotropic crystals*. Philos. Mag. **31** (1975), p. 179.

[211] **Scattergood R. et Bacon D.** *The strengthening effect of voids*. Acta Metall. **30** (1982), p. 1665.

[212] **Swinburne T.D., Dudarev S.L., Fitzgerald S.P., Gilbert M.R. et Sutton A.P.** *Theory and simulation of the diffusion of kinks on dislocations in bcc metals*. Phys. Rev. B **87** (2013).

[213] **Stroh A.N.** *Constrictions and jogs in extended dislocations*. Proc. Phys. Soc. B **67** (1954), p. 427.

[214] **Chen Z., Kioussis N., Ghoniem N. et Seif D.** *Strain-field effects on the formation and migration energies of self interstitials in alpha-fe from first principles*. Phys. Rev. B **81** (2010), p. 094102.

[215] **Simonelli G., Pasianot R. et Savino E.** *Point-defect computer simulation including angular forces in bcc iron*. Phys. Rev. B **50** (1994), p. 727.

[216] **Domain C. et Becquart C.** *Ab initio calculations of defects in Fe and dilute Fe-Cu alloys*. Phys. Rev. B **65** (2001), p. 024103.

[217] **Domain C., Becquart C.S. et Foct J.** *Ab initio study of foreign interstitial atom (C, N) interactions with intrinsic point defects in alpha -Fe*. Phys. Rev. B **69** (2004), p. 144112.

[218] **Hayward E., Deo C., Uberuaga B.P. et Tomé C.N.** *The interaction of a screw dislocation with point defects in bcc iron*. Philos. Mag. **92** (2012), p. 2759.

[219] **Kuykendall W.P., Cash W.D., Barnett D.M. et Cai W.** *On the existence of Eshelby's equivalent ellipsoidal inclusion solution*. Mathematics and Mechanics of Solids **17** (2012), p. 840.

[220] **Weinberger C., Cai W. et Barnett D.** *Elasticity of microscopic structures*. Lecture notes, Stanford University (2005).

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

HDR de Emmanuel Clouet , Lille 1, 2013

BIBLIOGRAPHIE

© 2014 Tous droits réservés.

doc.univ-lille1.fr

EMMANUEL CLOUET

37 ans, né le 5 juillet 1976

Service de Recherches de Métallurgie Physique
CEA Saclay, bât.520
91191 Gif-sur-Yvette cedex

☎ 01 69 08 66 63

emmanuel.clouet@cea.fr

Chercheur - Ingénieur au CEA

Expérience Professionnelle

Chercheur permanent au CEA — **depuis mars 2004**
Service de Recherches de Métallurgie Physique – CEA Saclay

Mise à disposition — **03/07 – 03/09** (2 ans)
Laboratoire de Métallurgie Physique et Génie des Matériaux – Univ. Lille / CNRS

Préparation d'un doctorat : Séparation de Phase dans les Alliages Al-Zr-Sc: du Saut des Atomes à la Croissance de Précipités Ordonnés. — **03/01 – 02/04** (3 ans)
Service de Recherches de Métallurgie Physique – CEA Saclay
Financement CIFRE par Pechiney CRV
Encadrante CEA : Maylise Nastar (☎ 01 69 08 27 67) – *Pechiney : Christophe Sigli* (☎ 04 76 57 81 07)
Modélisation de la cinétique de précipitation
- à l'échelle atomique par des simulations de Monte Carlo cinétique sur réseau rigide
- à l'échelle mésoscopique par des simulations de dynamique d'amas et les théories classiques de la précipitation (germination / croissance / coalescence)

Coopérant du Service National : Étude ab-initio de la limite de solubilité de Zr dans Al. — **10/99 – 01/01** (16 mois)
Université du Texas à Austin (groupe du Prof. J. M. Sanchez)
Collaboration scientifique et financement de Pechiney CRV
Modélisation thermodynamique pour les alliages basée sur
- des calculs ab-initio (énergies, constantes élastiques, phonons)
- des développements en amas (modèle d'Ising généralisé)
- des méthodes de champ moyen (Bragg-Williams, CVM)

Stage ingénieur et DEA : Comportement mécanique des aciers dual-phase. — **04/99 – 07/99** (4 mois)
IRSID (centre de recherches du groupe Usinor) – Département Métallurgie Physique et Mécanique
Prédiction du comportement mécanique en fonction de la microstructure par des techniques d'éléments finis et d'homogénéisation et confrontation avec les observations expérimentales.

Stage de recherche : Diffusion et ségrégation d'équilibre dans les alliages. — **été 1998** (10 semaines)
Service de Recherches de Métallurgie Physique – CEA Saclay
Encadrante : Maylise Nastar (☎ 01 69 08 27 67)
Étude de l'influence sur la diffusion du mécanisme lacunaire par des techniques de champ moyen.

© 2014 Tous droits réservés.

Formation

Doctorat en sciences des matériaux de l'École Centrale Paris **Fév. 2004**

École Centrale Paris option Sciences et Génie des Matériaux **1996 – 1999**

DEA Mécanique et Matériaux à Paris XIII (pôle Firtech) **1998 – 1999**

Classes Préparatoires aux Grandes Écoles au lycée Chateaubriand à Rennes (Math. Spé. M') **1994 – 1996**

Prix

Médaille **Jean Rist** attribuée par la Société Française de Métallurgie et de Matériaux (SF2M) **2008**

Médaille de la Direction de l'Énergie Nucléaire (CEA) **2008**

Encadrement

Post-docs

Céline Varvenne (2 ans, de septembre 2011 à septembre 2013)
Modélisation multi-échelle des défauts d'irradiation dans le zirconium

Botond Bakò (1 an et demi, de mars 2009 à août 2010)
Modélisation de la montée des dislocations
Travail effectué en collaboration avec Laurent Dupuy (SRMA – CEA Saclay)

Dan Mordehai (2 ans, de février 2006 à janvier 2008)
Étude par dynamique des dislocations discrètes de la montée dans les métaux c.f.c.
Travail effectué en collaboration avec Marc Fivel (SIMaP, INP Grenoble)

Thèses

Nermine Chaari (depuis octobre 2012)
Modélisation atomique des dislocations dans le zirconium
Directeur de thèse : David Rodney (INP Grenoble)

Stages

Alexandre Prieur (6 mois, du 2 avril au 27 septembre 2013)
Stage de fin d'étude de l'Institut Supérieur des Matériaux et Mécanique Avancés (ISMANS, Le Mans), filière Sciences et Ingénierie des Matériaux
Modélisation à l'échelle atomique des dislocations dans le titane

Nermine Chaari (5 mois, du 16 avril au 14 septembre 2012)
Stage de fin d'étude de l'École Européenne de Chimie, Polymères et Matériaux (Strasbourg), filière Matériaux, et de master 2 Physique des matériaux de l'Université de Strasbourg
Modélisation à l'échelle atomique du glissement pyramidal de première espèce dans le zirconium

Olivier Mackain (5 mois, du 2 avril au 31 août 2012), co-encadré avec Céline Varvenne
Stage de 2ème année de l'École Nationale Supérieure de Chimie de Paris
Modélisation à l'échelle atomique des effets de l'hydrogène dans le zirconium

Mathieu Albagnac (5 mois, du 18 avril au 9 septembre 2011)
Stage de fin d'étude de l'École Européenne de Chimie, Polymères et Matériaux (Strasbourg), filière Matériaux
Simulation ab initio des dislocations mixtes M111 dans le fer

Mathilde Miguras (6 mois, du 28 juin au 17 décembre 2010)
Stage de césure en 2ème année à l'École Centrale Paris
Propriétés de cœur des dislocations mixtes dans le fer cubique centré

© 2014 Tous droits réservés.

Benjamin Lemoine (4 mois, du 21 avril au 30 août 2008)
Stage de 1ère année de master du Magistère de Physique Fondamentale de l'université d'Orsay
Modélisation des dislocations coin dans le fer en théorie élastique et simulations atomiques

Animation scientifique

Organisation de conférences

Membre du comité d'organisation du colloque « *Plasticité 2013* » (Paris, avril 2013) avec B. Devincre et R. Madec.

Membre du comité d'organisation de la conférence « *Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials* » (Avignon, juin 2010) avec F. Soisson, A. Finel, A. Deschamps et Y. Bréchet.
Actes de la conférence publiés dans *Solid State Phenomena* **172-174** (2011).

Membre du comité d'organisation du mini-colloque « *Plasticité à l'échelle nanométrique : de la dislocation aux nano-objets* » aux *12èmes Journées de la Matière Condensée* (Troyes, août 2010) avec J. Godet, J. Chen et D. Rodney

Participation à des programmes de recherche

ANR SIZHYP (2013-2016)
« Influence de la contrainte appliquée sur la précipitation des hydrures de zirconium » animé par A. Legris.

ANR SIMDIM (2007-2009)
« SImulation à l'échelle atomique des DIslocations dans les Matériaux » animé par L. Pizzagalli

CPR SMIRN (2001-2006)
« Simulation des Métaux Irradiés des Réacteurs Nucléaires » (CNRS / CEA / EDF).
Directeur scientifique : Jean-Louis Boutard

CPR Précipitation (2001-2006)
(Pechiney/ALCAN, ARCELOR, CEA, CNRS, INP-Grenoble, INSA-Lyon, Univ. Rouen, Univ. Marseille 3, ONERA)
Directeur scientifique : George Martin

Évaluation d'articles scientifiques

Environ 32 évaluations pour Phys. Rev. B, Phys. Rev. Lett., Acta Mater., Scripta Mater., Comput. Mater. Sci., Mater. Sci. Eng. A, J. Nucl. Mater., J. Alloys and Compounds, Philos. Mag., Philos. Mag. Lett., J. Chem. Phys. et Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.

Participation à des jurys de thèse

Membre invité dans le jury de thèse de Léa Tournadre soutenue le 20 décembre 2012 (Univ. La Rochelle)
« Vers une meilleure compréhension des mécanismes de déformation par croissance libre sous irradiation des alliages de zirconium »

© 2014 Tous droits réservés.

Publications

Contributions dans des ouvrages

E. Clouet, *Modeling of nucleation processes*, In D. U. Furrer and S. L. Semiatin (Eds.), ASM Handbook volume 22A, *Fundamentals of modeling for metals processing*, chap. 3D, pp. 203-219 (2009).

Journaux à comité de lecture

C. Varvenne, F. Bruneval, M.-C. Marinica et E. Clouet, *Point defect modeling in materials: coupling ab initio and elasticity approaches*, Phys. Rev. B **88** (2013), 134102.

L. Ventelon, F. Willaime, E. Clouet et D. Rodney, *Ab initio investigation of the Peierls potential of screw dislocations in bcc Fe and W*, Acta Mater. **61** (2013), 3973.

E. Clouet, *Screw dislocation in zirconium: an ab initio study*, Phys. Rev. B **86** (2012), 144104.

E. Clouet, *Dislocation core field. I. Modeling in anisotropic linear elasticity theory*, Phys. Rev. B **84** (2011), 224111.

E. Clouet, L. Ventelon et F. Willaime, *Dislocation core field. II. Screw dislocation in iron*, Phys. Rev. B **84** (2011), 224107.

E. Clouet, *Predicting dislocation climb: Classical modeling versus atomistic simulations*, Phys. Rev. B **84** (2011), 092106.

R. G. A. Veiga, M. Perez, C. S. Becquart, E. Clouet et C. Domain, *Comparison of atomistic and elasticity approaches for carbon diffusion near line defects in α-iron*, Acta Mater. **59** (2011), pp. 6963-6974.

B. Bakó, E. Clouet, L. M. Dupuy et M. Blétry, *Dislocation dynamics simulations with climb: kinetics of dislocation loop coarsening controlled by bulk diffusion*, Philos. Mag. **91** (2011), pp. 3173-3191.

E. Clouet et F. Soisson, *Atomic simulations of diffusional phase transformations*, In Y. Bréchet (Ed.), *Computational metallurgy and scale transitions,* C. R. Phys. **11** (2010), pp. 226-235.

T. Jourdan, F. Soisson, E. Clouet et A. Barbu, *Influence of cluster mobility on Cu precipitation in alpha-Fe: a cluster dynamics modeling*, Acta Mater. **58** (2010), pp. 3400–3405.

E. Clouet, *Elastic energy of a straight dislocation and contribution from core tractions*, Philos. Mag. **89** (2009), pp. 1565-1584.

E. Clouet, L. Ventelon et F. Willaime, *Dislocation core energies and core fields from first principles*, Phys. Rev. Lett. **102** (2009), p. 055502.

E. Clouet, S. Garruchet, H. Nguyen, M. Perez et C. S. Becquart, *Dislocation interaction with C in alpha-Fe: a comparison between atomic simulations and elasticity theory*, Acta Mater. **56** (2008), pp. 3450-3460.

D. Mordehai, E. Clouet, M. Fivel et M. Verdier, *Introducing dislocation climb in discrete dislocation dynamics*, Philos. Mag. (2008), **88** (2008), p. 899.

E. Clouet et M. Nastar, *Classical nucleation theory in ordering alloys precipitating with $L1_2$ structure*, Phys. Rev. B **75** (2007), p. 132102.

E. Clouet et A. Barbu, *Using cluster dynamics to model electrical resistivity measurements in precipitating Al-Sc alloys*, Acta Mater. **55** (2007), pp. 391-400.

E. Clouet, *The vacancy - edge dislocation interaction in fcc metals: a comparison between atomic simulations and elasticity theory*, Acta Mater. **54** (2006), pp. 3543-3552.

E. Clouet, L. Laé, T. Épicier, W. Lefebvre, M. Nastar et A. Deschamps, *Complex precipitation pathways in multi-component alloys*, Nat. Mater. **5** (2006), pp. 482-488.
article sélectionné dans : - *News and Views*, Nat. Mater **5** (2006), pp. 435-436.
- *Editors' Choice: Highlights of the recent literature*, Science **312** (2006), p. 1575.

© 2014 Tous droits réservés.

E. Clouet, A. Barbu, L. Laé et G. Martin, *Precipitation kinetics of Al_3Zr and Al_3Sc in aluminum alloys modeled with cluster dynamics*, Acta Mater. **53** (2005), pp. 2313-2325.

M. Nastar et E. Clouet, *Mean field theories for the description of diffusion and phase transformations controlled by diffusion*, Phys. Chem. Chem. Phys. **6** (2004), pp. 3611-3619.

E. Clouet, M. Nastar et C. Sigli, *Nucleation of Al_3Zr and Al_3Sc in aluminum alloys: from kinetic Monte Carlo simulations to classical theory*, Phys. Rev. B **69** (2004), pp. 064109 1-14.

E. Clouet, J.M. Sanchez et C. Sigli, *First-principles study of the solubility limit of Zr in Al*, Phys. Rev. B **65** (2002), pp. 094105 1-13.

Actes de conférences

E. Clouet, *Simulation à l'échelle atomique des dislocations*, Colloque MECAMAT, *Nouvelles approches en mécanique expérimentale*, E. Maire, J.-Y. Buffière et O. Bouaziz (Éds.), Aussois 2010.

D. Mordehai, E. Clouet, M. Fivel et M. Verdier, *Annealing of dislocation loops in dislocation dynamics simulations*, IOP Conf. Series: Mater. Sci. Eng. **3** (2009), 012001.

D. Mordehai, E. Clouet, M. Fivel et M. Verdier, *Introducing dislocation climb in discrete dislocation dynamics*, in Continuum models and discrete systems, CMDS-11 conf. proc., S. Forest et D. Jeulin (Éds.), Presses des Mines (Paris, 2008), pp. 291-296.

A. Barbu et E. Clouet, *Cluster dynamics modeling of materials: advantages and limitations*, Solid State Phenom. **129** (2007), pp. 51-58.

E. Clouet, C. Hin, D. Gendt, M. Nastar et F. Soisson, *Kinetic Monte Carlo simulations of precipitation*, Adv. Eng. Mater. **8** (2006), pp. 1210-1214.

E. Clouet, M. Nastar, A. Barbu, C. Sigli et G. Martin, *An atomic and mesoscopic study of precipitation kinetics in Al-Zr-Sc alloys*, Adv. Eng. Mater. **8** (2006), pp. 1228-1231.

E. Clouet, *The vacancy – edge dislocation interaction in FCC Metals*, in: P. Gumbsch (Éd.), *Proceedings of the Third International Conference Multiscale Materials Modeling* (Fraunhofer IRB Verlag, Freiburg, 2006), pp. 708-711.

E. Clouet, M. Nastar, A. Barbu, C. Sigli et G. Martin *Precipitation in Al-Zr-Sc alloys: a comparison between kinetic Monte Carlo, cluster dynamics and classical nucleation theory*, in: J.M Howe, D.E. Laughlin, J.K. Lee, U. Dahmen et W.A. Soffa (Éds.), *Solid-solid phase transformations in inorganic materials* (TMS, 2005), **2**, pp. 683-703.

E. Clouet et M. Nastar, *Monte Carlo study of the precipitation kinetics of Al_3Zr in Al-Zr*, in: P.E.A. Turchi, A. Gonis, K. Rajan et A. Meike (Éds.), *Complex inorganic solids - Structural, stability, and magnetic properties of alloys* (Springer Verlag, New York, 2005), pp. 215-240.

© 2014 Tous droits réservés.

Communications orales

E. Clouet et C. Varvenne **(conférence invitée)**
Coupling ab initio and elasticity approaches to model point defects in materials
Workshop on Modelling of Radiation Damage and its Effects on Materials, Oxford
25 – 27 septembre 2013.

C. Varvenne et E. Clouet
Atomic scale modeling of point defects in materials: Coupling ab initio and elasticity approaches
TMS Annual Meeting, symp. « Mesoscale computational materials science of energy materials », San Antonio
3 – 7 mars 2013.

C. Varvenne et E. Clouet
Atomistic modeling of point defects and small clusters: Coupling ab initio and elasticity approaches
MRS Fall Meeting, symp. « Defects and microstructure complexity in materials », Boston, 25 – 30 nov. 2012.

C. Varvenne et E. Clouet
Atomic scale modeling of point defects in materials: Coupling ab initio and elasticity approaches
Multiscale Materials Modeling, symp. « Microstructure evolution across multiple length scales: Defects to material properties », Singapour, 15 – 19 oct. 2012.

E. Clouet
Ab initio modeling of screw dislocations in zirconium
Dislocation 2012, Budapest, 26 – 31 août 2012.

E. Clouet, M. Miguras et M. Albagnac
Core properties of mixed dislocations in bcc iron
TMS Annual Meeting, symp. « Mechanical behavior at nanoscale I », Orlando, 11 – 15 mars 2012.

E. Clouet
Screw dislocations in zirconium: an ab initio study
TMS Annual Meeting, « Symposium in memory of Patrick Veyssière: understanding the mechanisms controlling plastic flow », Orlando, 11 – 15 mars 2012.

E. Clouet, M. Nastar, A. Barbu et C. Sigli **(conférence invitée)**
Modélisation de la cinétique de précipitation dans les alliages Al-Zr-Sc
Colloque Matériaux, Mécanique, Microstructures (3M) :« Alliages légers pour le transport », INSTN, 20 – 21 juin 2011.

E. Clouet
Screw dislocations in zirconium: an ab initio study
MRS Spring Meeting, symp. « Fundamental science of defects and microstructure in advanced materials for energy », San Francisco, 26 – 30 avril 2011.

L. Ventelon, F. Willaime et E. Clouet
Core properties of screw dislocations in Fe and W based materials
TMS Annual Meeting, symp. « Thermally activated processes in plastic deformation », San Diego, 27 fév. – 3 mars 2011.

E. Clouet
Propriétés de cœur des dislocations vis dans le zirconium
Colloque Plasticité 2011, Lille, 4 – 6 avril 2011.

C. C. Fu, L. Ventelon, M. C. Marinica, E. Clouet et F. Willaime
From point defects to dislocation cores: success and limitations of DFT calculations in iron
Workshop on Ab initio Description of Iron and Steels (ADIS), Ringberg Castle, Allemagne, 24-29 Octobre 2010.

L. Ventelon, F. Willaime et E. Clouet
Structure de cœur et décrochements des dislocations vis dans le fer et le tungstène : étude ab initio
12èmes Journées de la Matière Condensée, mini-colloque « Plasticité à l'échelle nanométrique : de la dislocation aux nano-objets », Troyes, 23 – 27 août 2010.

© 2014 Tous droits réservés.

T. Jourdan, J. L. Bocquet, F. Soisson, E. Clouet et A. Barbu
Infuence of cluster mobility on Cu-precipitation in α-Fe: cluster dynamics and event-based Monte Carlo modeling
Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials, Avignon, 6 – 11 juin 2010.

E. Clouet, S. Garruchet, H. Nguyen, M. Perez et C. Becquart **(conférence invitée)**
Dislocation interaction with C in α iron: atomic simulations vs elasticity theory
Workshop « Carbon and nitrogen in steels: measurement, phase transformations and mechanical properties »
Rouen, 29 – 30 avril 2010.

E. Clouet
Core traction contribution to the elastic energy of a dislocation
TMS Annual Meeting, « The Vasek Vitek honorary symposium on crystal defects, computational materials science and applications », Seattle, 14 – 18 février 2010.

L. Ventelon, F. Willaime, E. Clouet et M. C. Marinica
Core structure and kinks of screw dislocations in Fe and W from first-principles
TMS Annual Meeting, « The Vasek Vitek honorary symposium on crystal defects, computational materials science and applications », Seattle, 14 – 18 février 2010.

E. Clouet, L. Ventelon et F. Willaime **(conférence invitée)**
Simulation à l'échelle atomique des dislocations
Colloque MECAMAT « Nouvelles approches en mécanique expérimentale »
Aussois, 11 – 15 janvier 2010.

L. Ventelon, E. Clouet et F. Willaime
Straight and kinked screw dislocations in Fe and W from first-principles
MRS Fall Meeting, symposium « Multiphysics modeling in materials design », Boston, 30 nov. – 4 déc. 2009.

L. Ventelon, F. Willaime et E. Clouet
Core structure of screw dislocations in Fe from first-principles
Euromat, Glasgow, Royaume-Uni, 7 – 10 septembre 2009.

D. Mordehai, E. Clouet, M. Fivel et M. Verdier
Introducing dislocation climb by bulk diffusion in discrete dislocation dynamics simulations
TMS Annual Meeting, symp. « Dislocations: 75 years of deformation mechanisms », San Francisco, 15 – 19 fév. 2009.

L. Ventelon, F. Willaime et E. Clouet
Simulation ab initio des cœurs de dislocation vis dans le fer
Réunion GDR-DFT++, Dourdan, 3 – 6 février 2009.

F. Soisson, E. Clouet, C.-C. Fu, M. Levesque et M. Nastar
Kinetics of precipitation in iron based alloys: thermal ageing and irradiation effects
MRS Fall Meeting, symposium « Materials for future fusion and fission technologies », Boston, 2 – 4 déc. 2008.

E. Clouet, L. Ventelon et F. Willaime **(conférence invitée)**
Progrès dans la modélisation atomique des dislocations
Séminaire de l'Académie des Sciences « Matériaux pour les réacteurs de fusion nucléaire : problèmes fondamentaux »
Paris, 19 et 20 novembre 2008.

E. Clouet, S. Garruchet, H. Nguyen, M. Perez et C. Becquart,
Dislocation interaction with C in alpha-Fe: a comparison between atomic simulations and elasticity theory
Multiscale Materials Modeling, symp. « Elasticity to atomistics: predictive modeling of defect behavior », Tallahassee, 27 – 31 oct. 2008.

© 2014 Tous droits réservés.

D. Mordehai, E. Clouet, M. Fivel et M. Verdier
Modeling climb by bulk diffusion in discrete dislocation dynamics simulations
Multiscale Materials Modeling, symp. « Multiscale modeling of microstructure evolution in materials », Tallahassee, 27 – 31 oct. 2008.

L. Ventelon, E. Clouet et F. Willaime
Core structure, Peierls potential and kinks of <111> screw dislocation in iron from first principles
Multiscale Materials Modeling, symp. « Elasticity to atomistics: predictive modeling of defect behavior », Tallahassee, 27 – 31 oct. 2008.

E. Clouet, L. Ventelon et F. Willaime **(conférence invitée)**
De l'ab initio à la dynamique des dislocations : la plasticité dans les aciers ferritiques
Journée scientifique CCRT : "Simulation et physique multi-échelle", Saclay, 17 octobre 2008.

D. Mordehai, E. Clouet, M. Fivel et M. Verdier
Introducing dislocation climb by bulk diffusion in discrete dislocation dynamics simulations
Dislocations 2008, Honk Kong, 13 – 17 octobre 2008.

L. Ventelon, F. Willaime et E. Clouet
Structure de cœur et potentiel de Peierls des dislocations vis dans le fer a : étude ab initio
Journées Simulation Numérique, Paris, 6 – 7 juin 2008.

E. Clouet, L. Ventelon et F. Willaime
Dislocation et relaxation du cœur en théorie élastique : l'exemple de la dislocation vis dans le fer
Colloque Plasticité 2008, Nancy, 10 – 12 mars 2008.

S. Garruchet, E. Clouet, H. Nguyen, M. Perez et C. S. Becquart
Interactions carbone-dislocation dans le fer : Comparaison entre calculs atomiques et théorie élastique.
Colloque Plasticité 2008, Nancy, 10 – 12 mars 2008.

L. Ventelon, F. Willaime, E. Clouet et P. Leyronnas
Structure and mobility of screw dislocations in iron from first principles
13th ICFRM, Nice, 10 – 14 décembre 2007.

D. Mordehai, E. Clouet et M. Fivel
Modelling dislocation climb in dislocation dynamics simulations.
MRS Fall Meeting, symposium « Theory, modeling, and numerical simulation of multiphysics materials behavior », Boston, 26 – 30 novembre 2007.

D. Mordehai, E. Clouet, M. Fivel et M. Verdier
Introducing dislocation climb in discrete dislocation dynamics simulations
EuroMat, Nürnberg, 10 – 13 septembre 2007.

D. Mordehai, E. Clouet, M. Fivel et M. Verdier
Modeling dislocation climb in discrete dislocation dynamics
Colloque Plasticité 2007, Poitiers, 19 – 21 mars 2007.

E. Clouet
The vacancy-edge dislocation interaction in fcc metals
TMS Annual Meeting, symp. « Plasticity from the atomic scale to constitutive laws », Orlando, 25 fév. – 1er mars 2007.

D. Mordehai, E. Clouet, M. Fivel et M. Verdier
Modeling dislocation climb at the mesoscopic scale
Matériaux 2006, Dijon, France, 13-17 novembre 2006.

E. Clouet
The vacancy-edge dislocation interaction
Multiscale Materials Modeling, symp. « Multiscale modeling of irradiation and aging of materials », Freiburg, 18 – 22 sept. 2006.

© 2014 Tous droits réservés.

E. Clouet, C. Hin, D. Gendt, M. Nastar et F. Soisson
Simulations en Monte Carlo cinétique pour la précipitation
Journées d'Automne de la SF2M, Paris, 25 – 27 octobre 2005.

E. Clouet, M. Nastar, A. Barbu, C. Sigli et G. Martin **(conférence invitée)**
Precipitation in Al-Zr and Al-Sc Alloys: a comparison between kinetic Monte Carlo, cluster dynamics and classical nucleation theory
Solid-Solid Phase Transformations in Inorganic Materials, Phoenix, 29 mai – 4 juin 2005.

E. Clouet, M. Nastar et A. Barbu
Precipitation in a multi-component alloy: combining atomic and mesoscopic simulations
Workshop « Multiscale numerical methods for advanced materials » of Multimat network,
Paris (Institut Henri Poincarré), 14 – 16 mars 2005.

E. Clouet, M. Nastar et C. Sigli
Kinetics of precipitation in Al-Zr-Sc alloys : from atomic to mesoscopic models
TMS Annual Meeting, symposium « Computational thermodynamics and phase transformations »,
San Francisco, 13 – 17 février 2005.

E. Clouet, M. Nastar et C. Sigli
Étude de la cinétique de précipitation de Al_3Zr dans Al-Zr
8èmes Journées de la Matière Condensée, mini-colloque « Dynamique des transitions de phase et défauts topologiques dans les matériaux : du microscopique au macroscopique », Marseille, 27 – 30 août 2002.

E. Clouet et M. Nastar
Monte Carlo study of the precipitation kinetics of Al_3Zr in Al-Zr
Third International Alloy Conference, Lisbonne, 30 juin – 5 juillet 2002.

E. Clouet, M. Nastar, J. M. Sanchez et C. Sigli
Ab-initio study of the precipitation of Al_3Zr in Al-Zr
Calphad XXXI, Stockholm, 5 – 10 mai 2002.

E. Clouet, J. M. Sanchez et C. Sigli
Étude ab-initio de la limite de solubilité de Zr dans Al
Simulation à l'échelle atomique : de la théorie aux applications industrielles, Autrans, 25 – 27 septembre 2001.

E. Clouet, J. M. Sanchez et C. Sigli
First principles study of the solubility of Zr in Al
Thermodynamic and Structural Properties of Materials, Avignon, 9 – 14 septembre 2001.

Communications par affiche

N. Chaari, E. Clouet et D. Rodney
Modélisation ab initio des dislocations vis dans le zirconium : Glissement secondaire dans les plans pyramidaux
Colloque Plasticité 2013, Paris, 17 – 19 avril 2013.

C. Varvenne, O. MacKain et E. Clouet
Vacancy clustering in zirconium and the influence of hydrogen from ab initio calculations
TMS Annual Meeting, symp. « Microstructural processes in irradiated materials », San Antonio
3 – 7 mars 2013.

E. Clouet
Modélisation ab initio des dislocations vis dans le zirconium
Colloque Plasticité 2012, Metz, 11 – 13 avril 2012.

M. Miguras et E. Clouet
Core properties of mixed dislocations in bcc iron
MRS Spring Meeting, symp. « Fundamental Science of Defects and Microstructure in Advanced Materials for Energy »
San Francisco, 26 – 30 avril 2011.

© 2014 Tous droits réservés.

E. Clouet et M. Miguras
Propriétés de cœur des dislocations mixtes dans le fer cubique centré
Colloque Plasticité 2011, Lille, 4 – 6 avril 2011.

E. Clouet
Contribution des tractions de cœur à l'énergie élastique d'une dislocation rectiligne
Colloque Plasticité 2009, Marseille, 15 – 17 juin 2009.

E. Clouet, L. Ventelon et F. Willaime
Dislocation core fields and elasticity theory: the screw dislocation in iron
Multiscale Materials Modeling, symp. « Multiscale mechanics », Tallahassee, 27 – 31 octobre 2008.

E. Clouet
Étude de l'interaction dislocation – lacune dans les metaux cfc
Colloque Plasticité 2006, Sévrier (Annecy), 27 – 29 mars 2006.

E. Clouet, M. Nastar, A. Barbu, C. Sigli et G. Martin
An atomic and mesoscopic study of precipitation kinetics in Al-Zr-Sc alloys
Journées d'Automne de la SF2M, Paris, 25 – 27 octobre 2005.

E. Clouet, M. Nastar et C. Sigli
Modélisation de la précipitation de Al_3Zr dans Al
Journées Simulation Numérique, Paris, 22 – 23 mai 2003.

E. Clouet, C. Sigli et J. M. Sanchez
Étude ab-initio de la précipitation de Al_3Zr dans Al
Journées d'Automne de la SF2M, Paris, 29 – 31 octobre 2001.

Séminaires invités

E. Clouet
Coupling elasticity theory and atomic simulations to model dislocations in iron
Interdiscplinary Center for Advanced Materials Simulation, Bochum, Allemagne, 5 juillet 2010.

© 2014 Tous droits réservés.