

# Migration d'interfaces en mécanique des champs de dislocations et de désinclinaisons généralisées

V. Taupin, C. Fressengeas

LEM3, Université de Lorraine/CNRS/Arts et Métiers ParisTech, France, {vincent.taupin, claud.fressengeas}@univ.lorraine.fr

**Résumé** — Les équations fondamentales de la mécanique des champs de dislocations et de désinclinaisons généralisées sont brièvement rappelées en petites transformations. Elles sont appliquées, à l'aide d'une méthode d'éléments finis, à la modélisation de la structure d'interfaces : joints de grains ou interphases dans un polycristal, et à leur migration sous chargement extérieur ou en raison de contraintes internes.

**Mots clefs** — dislocations, désinclinaisons, joints de grains.

## 1. Introduction

Les dislocations sont des boucles de défauts topologiques limitant des surfaces finies au travers desquelles le déplacement élastique d'un milieu continu subit une discontinuité [8]. La non-unicité du déplacement entraîne l'incompatibilité du tenseur de distorsion élastique et l'existence d'un champ de tenseurs des densités de dislocation  $\alpha$  d'ordre 2, appelé champ de tenseurs de Nye. De manière analogue, les désinclinaisons généralisées (g-désinclinaisons) sont des boucles de défauts topologiques de second ordre limitant des surfaces au travers desquelles le champ de tenseurs de distorsion élastique subit lui-même une discontinuité [1]. Dans ces conditions le champ de tenseurs de distorsion élastique de second ordre (2-distorsion) est également incompatible, et il existe un champ de tenseurs  $\pi$  des densités de g-désinclinaisons, d'ordre 3. Lorsque les discontinuités de distorsion concernent seulement le champ de rotations, les g-désinclinaisons sont simplement des désinclinaisons conventionnelles. Elles ne prennent tout leur sens qu'en présence de discontinuités additionnelles de déformation. On sait que les densités de dislocations peuvent être très fortes dans les matériaux cristallins usuels, et les g-désinclinaisons sont également observées systématiquement le long des joints de grains dans un polycristal, et le long des interphases dans un matériau multiphasé.

Les propriétés élastiques des milieux présentant des incompatibilités élastiques de premier et second ordre, c'est-à-dire contenant des dislocations et des g-désinclinaisons, et dont l'énergie libre est supposée ne dépendre que des distorsions élastiques de premier et de second ordre, sont gouvernées par des lois de comportement reliant ces dernières à leurs quantités conjuguées, c'est-à-dire le tenseur des contraintes (non symétrique) et le tenseur des hyper-contraintes (d'ordre 3). L'équilibre mécanique demande alors que les lois de second ordre fournies par Mindlin-Eshel [6] soient satisfaites. La théorie de l'élasticité incompatible ainsi construite se réduit à celle de Mindlin-Eshel lorsque les densités de défauts cristallins ( $\alpha, \pi$ ) s'annulent.

Le mouvement des dislocations est le vecteur microscopique principal de la plasticité des matériaux cristallins à grains suffisamment gros, ou avec un nombre de systèmes de glissement cristallin suffisant (supérieur ou égal à 4 dans un polycristal). En revanche, la plasticité est largement due au mouvement des joints de grains, et donc des g-désinclinaisons, dans les matériaux à grains de taille nanométrique, car les phénomènes d'interface y deviennent prépondérants, ou lorsque les systèmes de glissement cristallin ne sont pas assez nombreux, comme dans le cas de l'olivine [3]. Il résulte de la présence des g-désinclinaisons aux interfaces qu'elles sont susceptibles de devenir un vecteur essentiel de la plasticité

des matériaux dans ces deux cas. Les lois cinématiques du mouvement des dislocations et des g-désinclinaisons découlent d'axiomes de conservation du défaut topologique : vecteur de Burgers  $\mathbf{b}$  pour les dislocations, discontinuité  $\mathbf{\Pi}$  du tenseur de 2-distorsion élastique pour les g-désinclinaisons. Ce sont des équations de transport des densités de défauts  $(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\pi})$  incluant, pour les dislocations, un terme de source résultant du mouvement des g-désinclinaisons. Pour déterminer complètement la dynamique des densités  $(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\pi})$ , ces équations cinématiques doivent être complétées par des lois constitutives pour la mobilité des dislocations et des g-désinclinaisons, qui doivent elles-mêmes assurer le caractère défini-positif de la dissipation mécanique. A ces conditions, on peut construire une théorie des transformations élasto-viscoplastiques couplées aux transformations de phase, où les champs de déplacements et les champs de densité de défauts  $(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\pi})$  sont les inconnues d'un problème aux limites bien posé, susceptible d'être résolu par une méthode d'éléments finis ou par une méthode FFT pour des conditions aux limites périodiques, et fournissant une généralisation non-locale, basée sur la physique des défauts cristallins, des équations conventionnelles de la mécanique des milieux continus.

Dans la suite de ce texte, nous fournissons en Section 2 un résumé des équations fondamentales de cette théorie en petites transformations et, en Section 3, leur application à des problèmes simples de recristallisation et de migration de joints de grains ou d'interfaces incohérentes. Les conclusions suivent en Section 4.

## 2. Équations fondamentales

Soit  $\mathbf{u}_e$ ,  $\mathbf{U}_e$  et  $\mathbf{G}_e$  respectivement les champs de déplacement, 1-distorsion et 2-distorsion élastiques. En élasticité compatible,  $\mathbf{G}_e = \mathbf{grad} \mathbf{U}_e = \mathbf{grad} \mathbf{grad} \mathbf{u}_e$ . L'existence d'une discontinuité  $\mathbf{\Pi} = \llbracket \mathbf{U}_e \rrbracket$  de la distorsion élastique au travers de la surface  $S$  de normale unitaire  $\mathbf{n}$  limitée par la courbe fermée  $C$ , l'incompatibilité de  $\mathbf{G}_e$  et la présence d'un champ de densités de g-désinclinaisons  $\boldsymbol{\pi}$  se traduisent par

$$\mathbf{\Pi} = \llbracket \mathbf{U}_e \rrbracket = \oint_C \mathbf{G}_e \cdot d\mathbf{r} = \int_S \boldsymbol{\pi} \cdot \mathbf{n} dS \quad (1)$$

d'où il ressort d'après le théorème de Stokes que

$$\mathbf{curl} \mathbf{G}_e = \boldsymbol{\pi} . \quad (2)$$

Il résulte de (2) que  $\mathbf{div} \boldsymbol{\pi} = 0$ , relation dont la signification physique est que les lignes de g-désinclinaisons se referment en boucles dans le domaine  $B$  considéré. Il est utile dans la suite d'invoquer la décomposition de Stokes-Helmholtz du champ  $\mathbf{G}_e$  en partie compatible  $\mathbf{G}_e^{//}$  et partie incompatible  $\mathbf{G}_e^\perp$  :

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_e &= \mathbf{G}_e^{//} + \mathbf{G}_e^\perp \\ \mathbf{div} \mathbf{G}_e^\perp &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

avec  $\mathbf{G}_e^\perp \cdot \mathbf{n} = 0$  sur la surface extérieure  $\partial B$  du domaine  $B$ . Il résulte en effet de (2,3) que  $\boldsymbol{\pi} = 0$  lorsque  $\mathbf{G}_e^\perp = 0$ . Définissant le tenseur de Nye  $\boldsymbol{\alpha}$  par

$$\boldsymbol{\alpha} = -\mathbf{G}_e : \mathbf{X} , \quad (4)$$

où  $\mathbf{X}$  est le tenseur alternatif de Levi-Civita, ce qui étend la définition usuelle  $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{curl} \mathbf{U}_e$  au cas où le rotationnel de  $\mathbf{U}_e$  n'est pas défini, on obtient à partir de (3,4) :

$$\boldsymbol{\alpha} = -\mathbf{G}_e^{//} : \mathbf{X} - \mathbf{G}_e^\perp : \mathbf{X} . \quad (5)$$

Les dislocations représentées par  $-\mathbf{G}_e^\perp : \mathbf{X}$  découlent de la présence des g-désinclinaisons. Lorsque  $\mathbf{U}_e$  ne présente pas de discontinuité tangentielle, son rotationnel est défini (voir [4] pour une démonstration

détaillée). Les dislocations représentées par  $-\dot{\mathbf{G}}_e^{//} : \mathbf{X}$  résultent alors uniquement de l'incompatibilité de  $\mathbf{U}_e$  et (5) se réduit à

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{curl} \mathbf{U}_e - \dot{\mathbf{G}}_e^\perp : \mathbf{X}. \quad (6)$$

On suppose maintenant que les dislocations et g-désinclinaisons  $(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\pi})$  possèdent des champs de vitesses associés  $\mathbf{V}_\alpha$  et  $\mathbf{V}_\pi$ . Lorsque  $(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\pi})$  représentent des objets individuels, ces champs de vitesses décrivent les mouvements de leurs cœurs. Ce sont des vitesses moyennes s'il s'agit d'objets plus étendus. Comme  $(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\pi})$  sont des défauts de ligne, leur dynamique est régie par des équations de conservation dont la forme locale est, pour les g-désinclinaisons :

$$\dot{\boldsymbol{\pi}} + \mathbf{curl}(\boldsymbol{\pi} \times \mathbf{V}_\pi) = 0. \quad (7)$$

Les équations (2,3,7) impliquent que

$$\dot{\mathbf{G}}_e^\perp = -\boldsymbol{\pi} \times \mathbf{V}_\pi + \mathbf{grad} \dot{\mathbf{U}}_s \quad (8)$$

où  $\dot{\mathbf{U}}_s$  est une 1-distorsion compatible complémentaire, indépendante du mouvement des g-désinclinaisons et précisée constitutivement ci-dessous par la relation (14). Pour les dislocations, on trouve à partir de (5) :

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = -\dot{\mathbf{G}}_e^{//} : \mathbf{X} - \dot{\mathbf{G}}_e^\perp : \mathbf{X}, \quad (9)$$

que l'on peut transformer en

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = -\mathbf{curl}(\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{V}_\alpha) - \dot{\mathbf{G}}_e^\perp : \mathbf{X}, \quad (10)$$

en invoquant la cinématique des flux de défauts de ligne au travers d'une courbe fermée. On vérifie alors que

$$\mathbf{div} \dot{\boldsymbol{\alpha}} = \dot{\boldsymbol{\pi}} : \mathbf{I}, \quad (11)$$

relation dont la signification physique est que les lignes de dislocation peuvent ne pas être des boucles (fermées) en présence de g-désinclinaisons, et qu'elles se terminent alors dans une région où ces défauts d'ordre supérieur sont présents. Si  $\mathbf{u}$  désigne le champ de déplacements matériels, le champ de 1-distorsion plastique  $\mathbf{U}_p$  peut être définie par

$$\mathbf{U}_p = \mathbf{grad} \mathbf{u} - \mathbf{U}_e, \quad (12)$$

de sorte que, d'après (8,9,12), le tenseur des vitesses de 1-distorsion plastique est

$$\dot{\mathbf{U}}_p = \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{V}_\alpha. \quad (13)$$

Contrairement à la relation (8), aucun terme compatible additionnel n'est inclus dans la relation (13), faute de mécanisme de plasticité complémentaire identifiable. Cependant, la partie compatible de  $\dot{\mathbf{U}}_p$  est identifiée avec  $\dot{\mathbf{U}}_s$  :

$$\dot{\mathbf{U}}_p^{//} = \dot{\mathbf{U}}_s. \quad (14)$$

En résumé, une représentation minimale des équations de champ est constituée par l'ensemble des équations (2,3,4,7,8,10,14), auxquelles il faut adjoindre les équations d'équilibre

$$\mathbf{div} (\mathbf{T} - \mathbf{div} \mathbf{M}^{sym}) = 0 \quad (15)$$

$$\mathbf{T}^{skew} + \mathbf{div} \mathbf{M}^{skew} = 0 \quad (16)$$

reliant le tenseur des contraintes  $\mathbf{T}$  (d'ordre 2, non symétrique) et le tenseur des hyper-contraintes  $\mathbf{M}$  (d'ordre 3), en l'absence d'efforts d'inertie et de densités volumiques d'efforts [6]. Dans ces équations, les parties symétriques et non-symétriques des tenseurs  $(\mathbf{T}, \mathbf{M})$  sont désignées respectivement par les

substantifs « sym » et « skew ». De la manière la plus simple possible, les lois constitutives de mobilité sont choisies de telle manière que les vitesses  $V_\alpha$  et  $V_\pi$  des dislocations et g-désinclinaisons soient des fonctions linéaires des forces motrices qui leur sont appliquées, c'est-à-dire la force de Peach-Koehler :  $F_\alpha = T^t \cdot \alpha : X$  appliquée aux densités de dislocations et une force de Peach-Koehler généralisée :  $F_\pi = M^t \cdot \pi : X$  appliquée aux densités de g-désinclinaisons. Le signe des coefficients de proportionnalité est choisi pour que la dissipation mécanique soit positive. Il convient enfin de choisir une fonction d'énergie libre du type  $\psi = \psi(\epsilon_e, G_e)$  pour l'établissement de lois d'élasticité fournissant  $(T, M)$  en fonction de  $(\epsilon_e, G_e)$  ( $\epsilon_e$  est le tenseur des taux de déformations). Dans cette présentation, on se contentera de lois linéaires, qui sont cependant non-locales car, outre les déformations  $\epsilon_e$ , elles font apparaître des courbures et des gradients de déformation. Les équations d'équilibre (15,16) permettent alors de déterminer le champ de déplacements matériels, pour une histoire de chargement et des conditions aux limites données. Lorsque  $\alpha = 0$  et  $\pi = 0$ , les équations du modèle se réduisent à la théorie de second gradient d'élasticité compatible de Mindlin-Eshel [6].

### 3. Dynamique d'interfaces

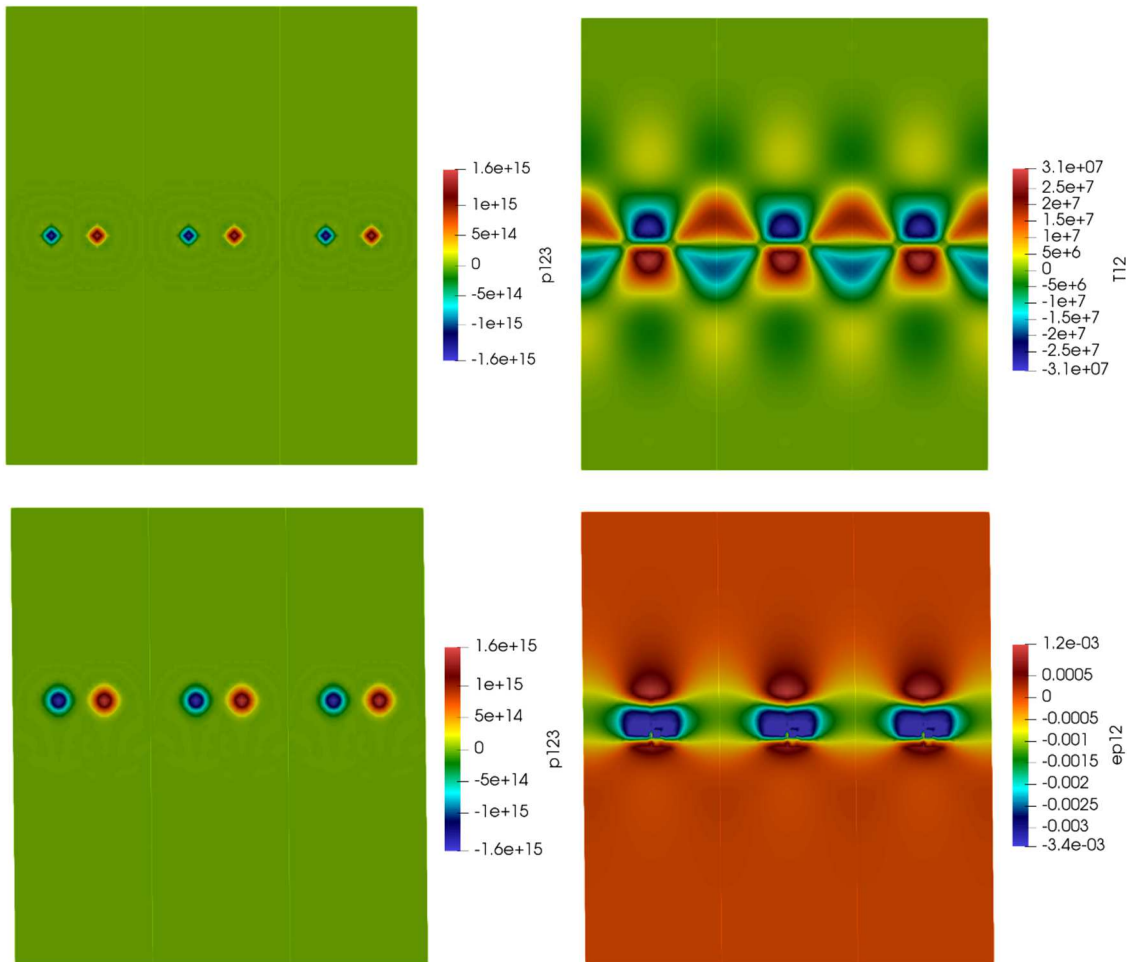


Figure 1. Migration dans le plan de symétrie  $(e_1, e_2)$  d'une interface de type joint de flexion, composée de dipôles de désinclinaisons généralisées  $\pi_{123}$ . Le vecteur unitaire  $e_1$  est horizontal,  $e_2$  est vertical. De haut en bas et de gauche à droite : champ de densités de désinclinaisons initial ; champ de contrainte de cisaillement  $T_{12}$  associé ; migration (normale) de l'interface sous cisaillement appliqué  $T_{12}$  aux bords de l'échantillon ; champ de

cisaillements plastiques  $\varepsilon_{12}^p$  produit par la migration de l'interface. Les dimensions de l'échantillon sont ( $45 \text{ nm} \times 150 \text{ nm}$ ).

A titre d'exemple, considérons des interfaces symétriques dont la structure et le mouvement peuvent être décrits dans une version plane des équations ci-dessus. Si  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$  est le plan de symétrie, les seules densités de défauts envisageables sont alors  $\pi_{ij3}$ ,  $(i, j) \in (1, 2)$  et  $(\alpha_{13}, \alpha_{23})$ . On suppose aussi que la fonction d'énergie libre soit quadratique, de sorte que les lois d'élasticité sont linéaires. En outre, ces lois présentent une symétrie cubique. La résolution numérique de ce modèle plan utilise une méthode d'éléments finis construite à l'aide du code ouvert FreeFem++ [5]. La Figure 1 montre en haut à gauche la distribution initiale de dipôles de g-désinclinaisons  $\pi_{123}$  qui rend compte de la structure d'un joint de flexion. Des conditions aux limites périodiques sont imposées à gauche et à droite de l'échantillon. La ligne des g-désinclinaisons est colinéaire au vecteur unitaire  $\mathbf{e}_3$  dans le plan  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_3)$  du joint de flexion perpendiculaire à la figure, et il existe une discontinuité de 1-distorsion élastique  $[[U_{12}^e]]$  au travers de ce plan et localisée à l'intérieur des dipôles. Le champ de contraintes de cisaillement  $T_{12}$  associé à cette distribution est figuré en haut à droite de la figure. La migration normale du joint de grains perpendiculairement à lui-même sous l'action d'un cisaillement extérieur  $T_{12}$  appliqué aux bords inférieur et supérieur de l'échantillon est représentée en bas à gauche. Le mouvement normal des g-désinclinaisons génère des dipôles de dislocations-coins  $\alpha_{13}$  glissant tangentiellement au joint de grains et produisant un champ de déformation plastique de cisaillement  $\varepsilon_{12}^p$  représenté en bas à droite. On voit que le cisaillement est localisé dans la bande parcourue par le joint de grains au cours de sa migration. On retrouve ainsi un mécanisme de déformation couramment observé et bien connu dans la littérature [2,3,7].

Le second exemple, illustré par la Figure 2, est celui d'une interface soumise à une compression normale. La distribution initiale de dipôles de g-désinclinaisons  $\pi_{223}$  rendant compte de la structure de l'interface est représentée en haut à gauche. Des conditions aux limites périodiques sont encore imposées à gauche et à droite de l'échantillon. La ligne des g-désinclinaisons est colinéaire au vecteur unitaire  $\mathbf{e}_3$  dans le plan  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_3)$  de l'interface, et il existe une discontinuité de 1-distorsion élastique  $[[U_{22}^e]]$  au travers de ce plan, localisées à l'intérieur des dipôles. Le champ de contraintes de traction-compression  $T_{22}$  associé à cette distribution est figuré en haut à droite. La migration normale de l'interface perpendiculairement à elle-même sous l'action d'une compression extérieure  $T_{22}$  appliquée aux bords inférieur et supérieur de l'échantillon est représentée en bas et à gauche de la figure. Le mouvement normal des g-désinclinaisons génère des dipôles de dislocations-coins  $\alpha_{23}$  dont la montée le long de l'interface produit un champ de déformation plastique de compression  $\varepsilon_{22}^p$  représenté en bas à droite. On voit encore que la déformation est localisée dans la bande parcourue par l'interface au cours de sa migration.

### 3. Conclusions

Nous démontrons à l'aide d'exemples de solution numérique de problèmes aux limites que la mécanique des champs de défauts cristallins généralisés (dislocations et g-désinclinaisons) est capable de traiter les problèmes d'évolution sous contrainte de microstructures de défauts associées à la déformation anélastique (plasticité et transformation de phase) d'un solide polycristallin, et de fournir simultanément sa réponse mécanique sur un intervalle de temps et pour des sollicitations mécaniques réalistes. Ce travail suggère tout d'abord qu'il est possible d'utiliser les méthodes de la mécanique des milieux continus à une échelle interatomique, pourvu que les lois d'élasticité, leur non-linéarité et leur non-localité soient convenablement précisées au cœur des défauts cristallins, et que la mobilité de ces défauts soit fournie en conformité avec les contraintes découlant du second principe de la thermodynamique. Il suggère en outre qu'il n'est ni nécessaire ni efficace d'un point de vue numérique de déterminer l'ensemble des vibrations atomiques pour modéliser la dynamique des défauts cristallins amenant à des phénomènes d'anélasticité aux échelles méso- et macroscopiques. Comme indiqué ci-dessus, certains

apports constitutifs limités sont certes nécessaires pour la mobilité des défauts individuels et les propriétés élastiques non-linéaires/non-locales du matériau à ces échelles, mais ce choix favorise l'efficacité numérique. Enfin, l'un des principaux mérites de cette approche est qu'elle suggère des méthodes naturelles de changement d'échelle par moyennes glissantes des densités de défauts et autres variables pour le développement de modèles méso- et macroscopiques de comportement des matériaux cristallins.

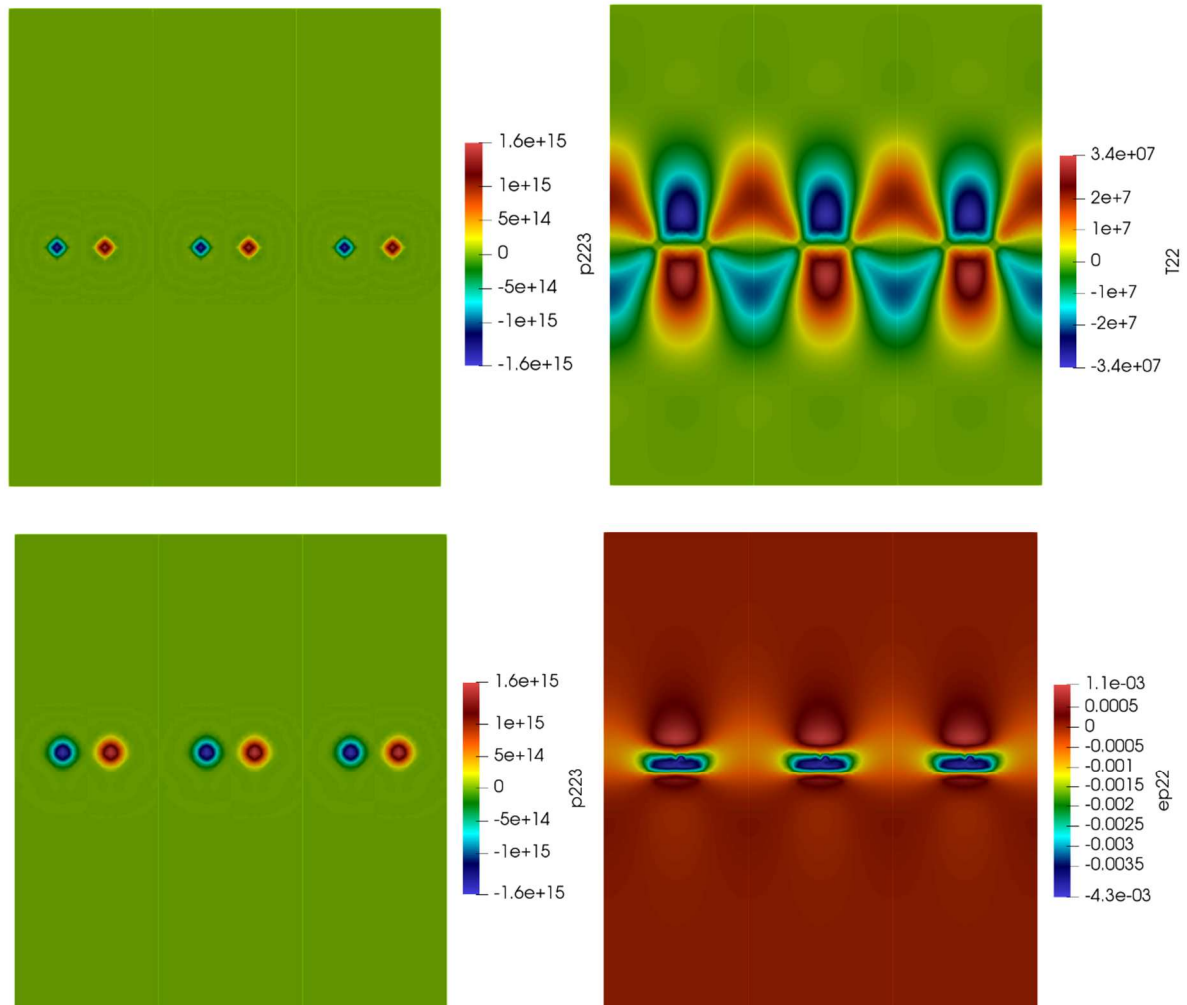


Figure 2. Migration dans le plan de symétrie  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$  d'une interface composée de dipôles de désinclinaisons généralisées  $\pi_{223}$ . Le vecteur unitaire  $\mathbf{e}_1$  est horizontal,  $\mathbf{e}_2$  est vertical. De haut en bas et de gauche à droite : champ de densités de désinclinaisons initial ; champ de contraintes de traction-compression  $T_{22}$  associé ; migration normale de l'interface consécutive à l'application d'une compression  $T_{22}$  aux bords de l'échantillon ; champ de déformation plastique de compression  $\epsilon_{22}^p$  produite par la migration de l'interface. Les dimensions de l'échantillon sont  $(45 \text{ nm} \times 150 \text{ nm})$ .

## Références

- [1] A. Acharya, C. Fressengeas, Coupled phase transformation and plasticity as a field theory of deformation incompatibility, Int. J. Fract. 174, 87-94, 2012.

- [2] J.W. Cahn, Y. Mishin, A. Suzuki, Coupling grain boundary motion to shear deformation, *Acta Mater.* 54, 4953–4975, 2006.
- [3] P. Cordier, S. Demouchy, B. Beausir, V. Taupin, F. Barou, C. Fressengeas, Disclinations provide the missing mechanism for deforming olivine-rich rocks in the mantle, *Nature* 507, 51-56, 2014.
- [4] C. Fressengeas, B. Beausir, Tangential continuity of the curvature tensor underpins disclination density determination from spatially mapped orientation data, *Int. J. Solids Struct.* 156-157, 210-215, 2019.
- [5] F. Hecht, O. Pironneau, A.L. Hyaric, K. Ohtsuka, K., freefem++. [www.freefem.org/ff++/](http://www.freefem.org/ff++/), 2016.
- [6] R.D. Mindlin, N.N. Eshel, On first strain gradient theories in linear elasticity, *Int. J. Solids Struct.* 4, 109-124, 1968.
- [7] V. Taupin, L. Capolungo, C. Fressengeas, Disclination mediated plasticity in shear-coupled boundary migration, *Int. J. Plasticity* 53, 179-192, 2014.
- [8] V. Volterra, Sur l'équilibre des corps élastiques multiplément connexes, *Ann. Sci. Ecol. Norm. Sup.* III 24, 401-517, 1907.