

## Contraintes induites par les parois de dislocations : étude par simulations de dynamique des dislocations

M. Jiang<sup>1,2</sup>, B. Devincré<sup>2</sup>, G. Monnet<sup>1</sup>,

<sup>1</sup>EDF R&D - MMC, Les Renraidières France

<sup>2</sup>LEM, CNRS-ONERA, Chatillon, France, devincré@onera.fr

**Résumé** — Dans un récent article [1] nous avons mis en évidence un effet Hall-Petch lors de la simulation par Dynamique de Dislocations (DD) de traction dans des grains de différentes tailles. Les dislocations accumulées sur les joints de grains semblent responsable de cet effet. Les contraintes induites par des parois de taille finie ne peuvent pas être données analytiquement. C'est pourquoi, nous utilisons les simulations DD pour déterminer le tenseur de contraintes en fonction de la distance aux parois de torsion, de flexion et épitaxiale. Des formules de prévisions empiriques ont été établies afin de rendre compte du caractère, de la hauteur, de la longueur de la paroi et de la densité surfaciques des dislocations. L'application de ces formules montre qu'il est possible de prévoir avec une précision d'environ 80% les contraintes induites par les dislocations accumulées aux joints de grains en conditions de glissement simple ou multiple dans un milieu élastique ou périodique.

**Mots clefs** — paroi de dislocations, contrainte interne, effet de taille.

### 1. Méthodologie

Des empilements surfaciques de segments de dislocations de différents caractères (voir Figure 1) et de différentes tailles et formes (Figure 2) ont été construits et insérés dans un milieu élastique isotrope.

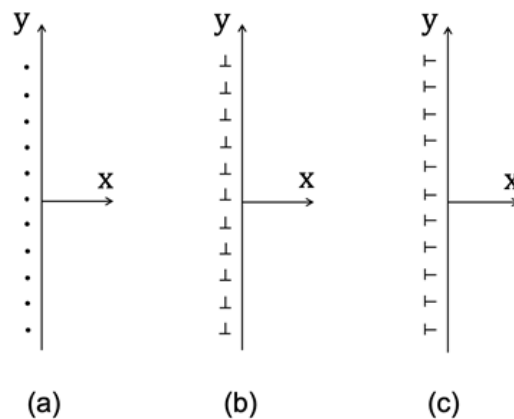


Figure 1 – parois basiques de dislocations : (a) paroi de torsion, (b) flexion et (c) épitaxiale

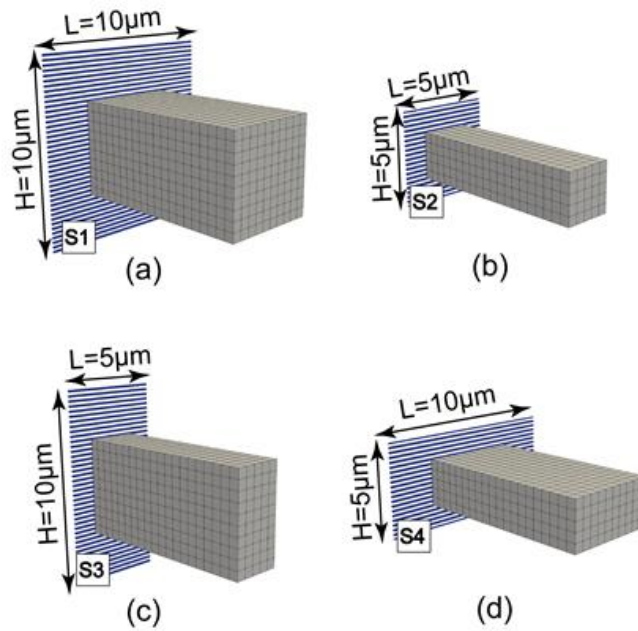


Figure 2 – formes des parois étudiées. Les zones grises indiquent les couches dans lesquelles les contraintes sont calculées et moyennées en fonction de la distance à la paroi.

Chaque dislocation dans la paroi est discrétisée à fin d'améliorer la précision des calculs de contraintes. Ces dernières sont ensuite moyennées dans des couches parallèles aux parois. L'évolution de la contrainte moyenne par couche en fonction de la distance aux parois permet d'obtenir le profil des contraintes dans l'espace.

## 2. Résultats DD

Les figures 3 et 4 montrent les profils des contraintes en fonction de la distance à la paroi pour les quatre formes considérées.

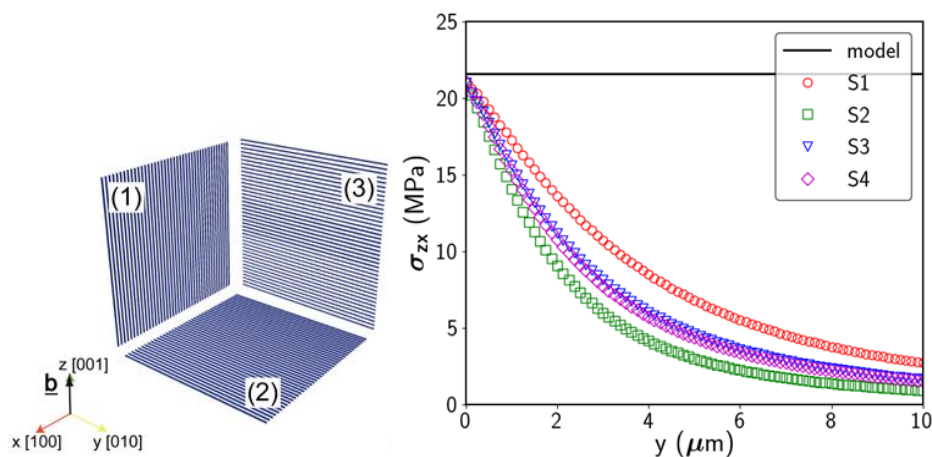


Figure 3 – le repère et les trois configurations étudiées : torsion (1), flexion (2) et épitaxiale (3). Evolution de la contrainte en fonction de la distance à la paroi de torsion pour les différentes formes illustrées dans la figure 2.

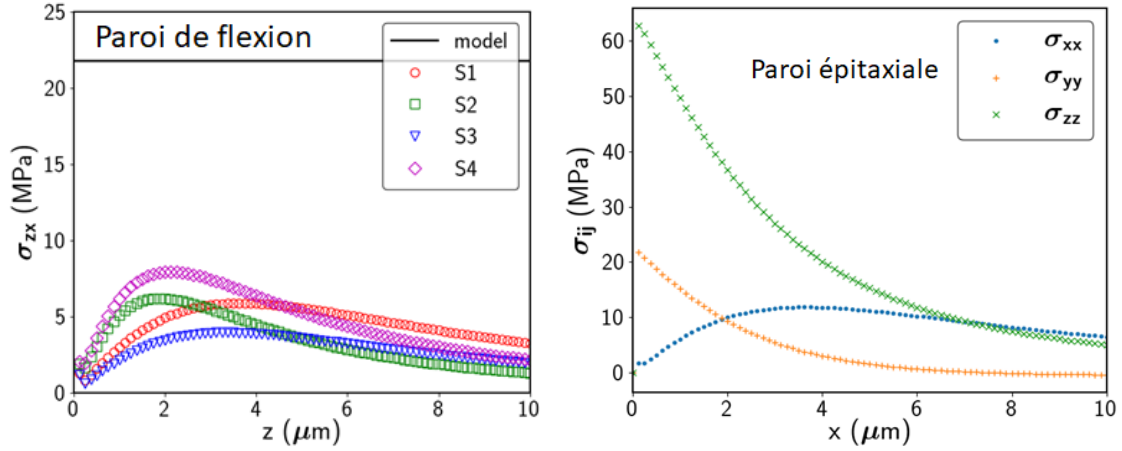


Figure 4 – évolution des contraintes dans les parois de flexion (différentes formes) et des trois composantes des contraintes induites par la paroi épitaxiale.

Dans les cas des parois de flexion et torsion, seulement une seule composante de cisaillement est générée, alors que trois composantes normales sont induites par une paroi épitaxiale.

Les figures 3 et 4 révèlent un effet de taille significatif. En effet, une paroi de taille infinie induit toujours un comportement asymptotique, avec des contraintes à l'infinie qui sont rarement nulles. Or, comme on peut s'y attendre, toutes les contraintes, mesurées en DD, induites par les parois de taille finie tendent vers zéro. Afin de représenter ce comportement, toutes les courbes des contraintes dans les Figures 3 et 4 ont été ajustées sur des fonctions exponentielles (monotone ou avec un maximum) en fonction de la densité surfacique, la hauteur et la longueur des dislocations formant les parois.

### 3. Rationalisation par la Mécanique de champs de dislocations

Le meilleur cadre permettant l'interprétation des résultats de la DD est la Mécanique des champs de dislocations (ou FDM pour Field Dislocation Mechanics). Ainsi, la singularité surfacique de la densité des dislocations sur la paroi peut être représentée simplement par une distribution de Dirac. Selon la FDM, en Hypothèse de Petites Perturbation (HPP), le tenseur de densité de dislocations ( $\underline{\alpha}$ ) est relié à la distorsion élastique incompatible  $\underline{U}_e^\perp$  par la relation :

$$\underline{\underline{\alpha}} = \text{curl } \underline{U}_e^\perp \quad (1)$$

L'intégration de la distorsion incompatible avec une densité surfacique singulière uniforme et infinie dans les deux directions de l'interface produit une fonction escalier (heavy side) centrée sur l'interface [2]. Par conséquent, les contraintes de part et d'autre de l'interface sont constantes et opposées. L'application de cette procédure sur les trois configurations de la figure 3, fournit les composantes non-nulles et l'amplitude de ces composantes. Dans le cas des parois de taille finie, il s'avère que l'eq. 1 prévoit exactement les composantes non-nulles dans tous les cas. Aussi, elle prévoit correctement la contrainte près de la paroi de torsion (voir la ligne horizontale de la figure 3), mais pas la diminution des contraintes, qui est la signature de l'effet de taille. En revanche, lorsque la paroi contient une composante coin (cas des parois de flexion et épitaxiale), l'eq. 1 ne prévoit ni l'amplitude au voisinage de l'interface ni le profil des contraintes calculées (voir les lignes horizontales dans la figures 4). Cette contradiction ne s'estompe pas lorsque la taille de la paroi tend vers l'infini. Ceci est compréhensible, si l'on se rappelle que la partie de la distorsion à rotationnel nul n'est pas contenue dans cette équation [3]. Malgré ces inconvénients, l'eq. 1 est utile afin de prévoir les composantes

non-nulles et de mettre à l'échelle les différentes amplitudes. Elle est donc utilisée pour ajuster des fonctions exponentielles appropriées sur les résultats de la DD. Ainsi, nous disposons pour les trois parois élémentaires des formules de prévision de contrainte en fonction de la densité de dislocations, de la hauteur de la paroi et de la longueur des dislocations.

#### 4. Validation des formules de prévision

Les configurations idéalisées de la figure 3 est pertinente pour une structure cristallographique de symétrie cubique simple avec des interfaces de type  $\langle 100 \rangle$ . Dans le cas général (autre symétrie et autre interface), le tenseur de densité surfacique (singulière) peut contenir jusqu'à neuf composantes. Dans ce travail, nous simplifions la géométrie en considérant que les interfaces restent de type  $\langle 100 \rangle$  mais les systèmes de glissements peuvent être quelconques. Par conséquent, chaque composante du tenseur de densité peut être assimilée à une paroi de flexion, torsion ou épitaxiale. Ainsi, grâce aux formules établies dans la section précédente, nous pouvons prévoir les contraintes induites par chaque composante. L'élasticité linéaire permet de superposer les contraintes induites par chaque composante de la densité pour arriver au tenseur total des contraintes.

Afin de tester nos formules et la méthode de superposition choisie, nous avons testé sept configurations (voir figure 5).

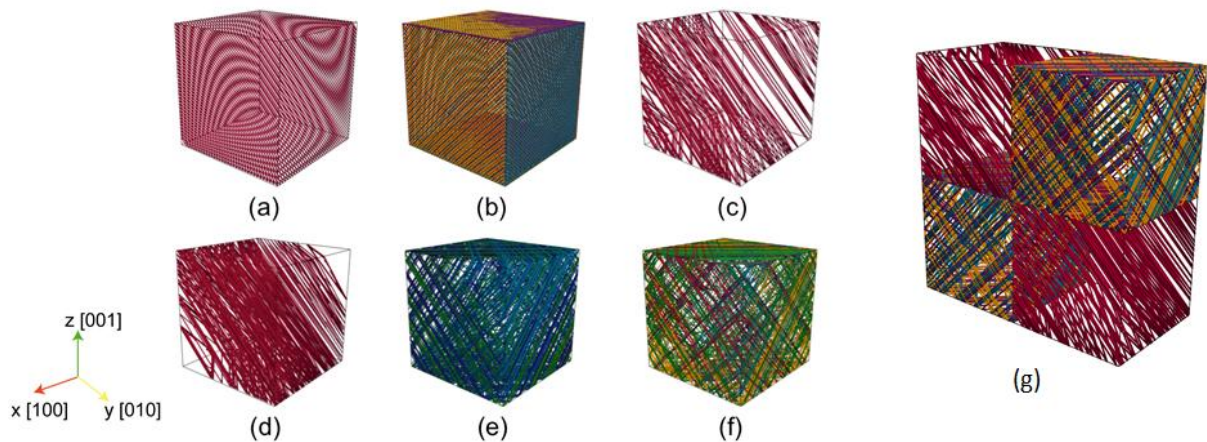


Figure 5 – simulations DD (cristal de cuivre) pour les tests des formules de prévision des contraintes internes : (a) distribution uniforme sur un système, (b) distribution uniforme sur plusieurs systèmes, (c) distribution aléatoire sur un système, (d) distribution hétérogène sur un système, (e) distribution hétérogène sur deux systèmes, (f) distribution hétérogène sur quatre systèmes et (g) distribution dans un agrégat périodique de quatre grains.

En faisant varier la distribution (uniforme, aléatoire, hétérogène), le nombre de systèmes actifs (1, 2, 4) dans un grain inséré dans un milieu élastique ou dans un agrégat périodique de quatre grains, nous balayons beaucoup de configurations. Dans chaque cas, nous comparons les contraintes internes au milieu des grains (cission sur les systèmes actifs) mesurées en DD et prévues par les formules de prévision. Les écarts entre les deux calculs sont rapportés dans le tableau 1.

Table 1 – écart entre les contraintes internes mesurées en DD et prévues par les formules de prévision fondées sur la densité surfacique aux joints de grains.

|       | (a) | (b) | (c) | (d) | (e) | (f) | (g) |
|-------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| Ecart | 3%  | 5%  | 8%  | 20% | 25% | 35% | 15% |

Le tableau montre que l'écart est inférieur à 10% lorsque la distribution des dislocations sur les six joints de grains est uniforme ou aléatoire. En revanche, lorsque les activités des systèmes de glissement est réduite dans les coins des cubes – en raison de la contrainte critique élevée de fonctionnement des sources de Frank-Read – la prévision s'écarte des mesures directes en DD. Ceci confirme que les formules de prévision sont bien adaptées aux parois de forme rectangulaire, mais pas tronquées. Néanmoins, pour l'agrégat périodique de 4 grains, l'écart n'est que de 15 %. L'addition des dislocations de part et d'autre des interfaces permet donc de réduire l'hétérogénéité de la densité de dislocations surfacique, ce qui améliore la prévision des contraintes.

#### 4. Conclusions

Il est montré que les contraintes induites par l'accumulation de dislocations aux joints de grains peuvent être modélisé par une densité surfacique singulière de dislocations. La mécanique des champs de dislocations (FDM) permet de prévoir les composantes des contraintes non-nulles. L'effet de taille des parois peut être facilement ajusté sur des fonctions exponentielles, calée (scaled) sur l'amplitude des contraintes prévues par la FDM, associées à la distorsion élastique incompatible engendrée par la densité surfacique des dislocations. L'accord entre la prévision et les calculs en DD des contraintes internes, dans des configurations très variées, justifie la superposition linéaire des contraintes et confirme l'utilité de la FDM dans la prévision des effets de taille en plasticité.

#### Références

- [1] M. Jiang, B. Devincere et G. Monnet. Effects of the grain size and shape on the flow stress: A dislocation dynamics study, *International Journal of Plasticity*, 113, 111-124, 2019.
- [2] C. Fressengeas. *Mechanics of Dislocation Fields.*, ISTE Ltd, 2017.
- [3] A. Acharya, A.J. Beaudoin "Grain-size effect in viscoplastic polycrystals at moderate strains", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48, 2213, 2000.