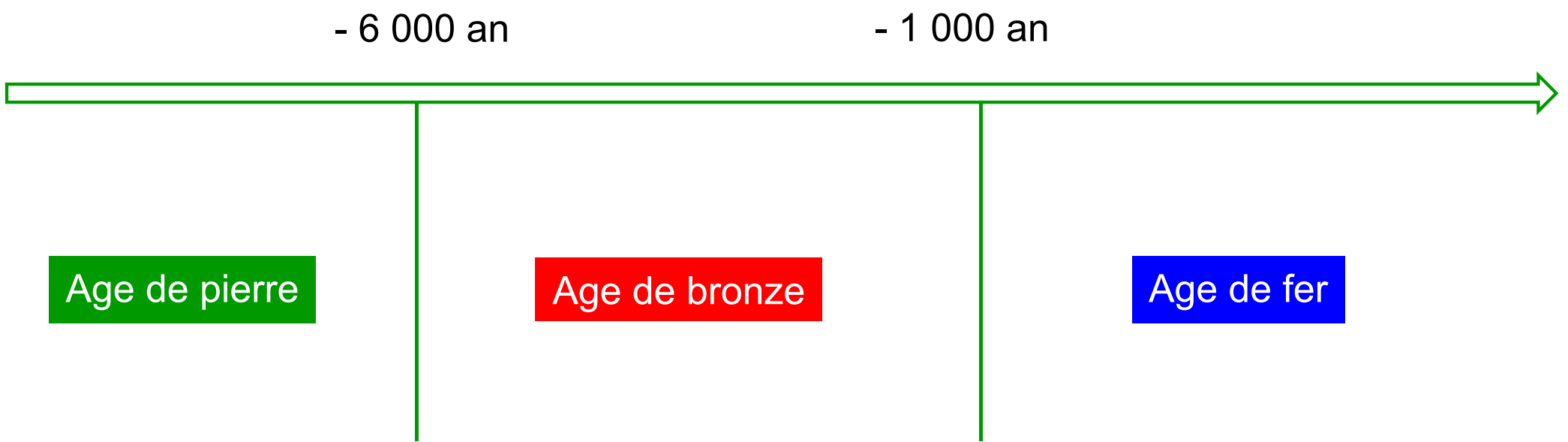


Modélisation à base physique du comportement mécanique du fer : de l'échelle atomique à la plasticité cristalline

Ghiath Monnet

EDF - R&D, MMC, Moret-sur-Loing, France



Abondance et propriétés mécaniques exceptionnelles

Les plus

- Limite d'élasticité contrôlable : 50 - 500 MPa
- Ductilité significative
- Forte sensibilité aux éléments interstitiels (C, Ni, etc.)
- Effets des traitements thermomécaniques (composition, refroidissement, etc)

Les moins

- Fragilité à basse température
- Forte activité chimique (corrosion)
- Comportement mécanique très complexe

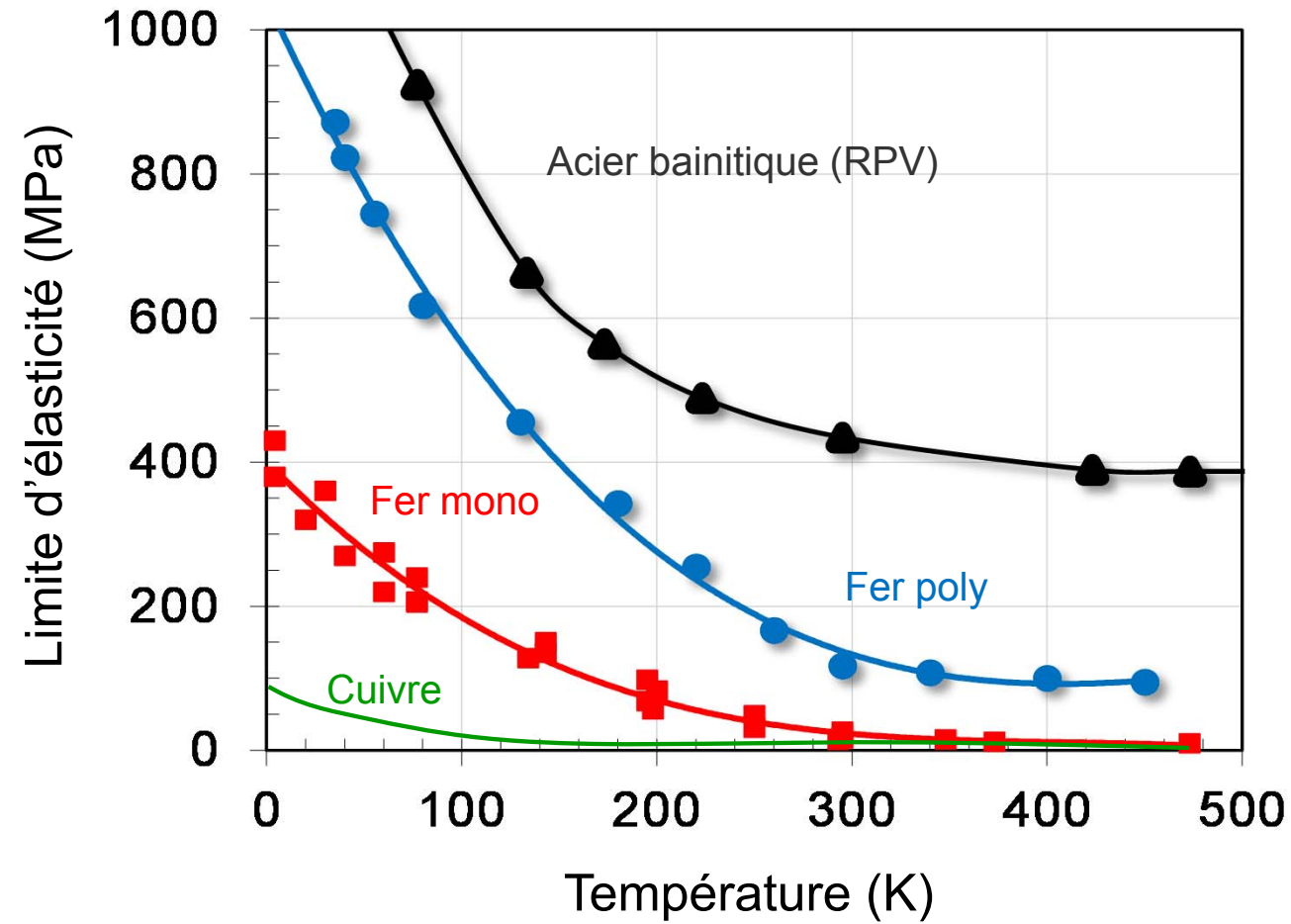
- Observations expérimentales du comportement mécanique des aciers
- Simulations aux échelles atomique et mésoscopique
- Equations constitutives
- Validation de la loi cristalline par éléments finis
- Conclusions et perspectives

Observation directe du mouvement de dislocations en MET

Par courtoisie de D. Caillard

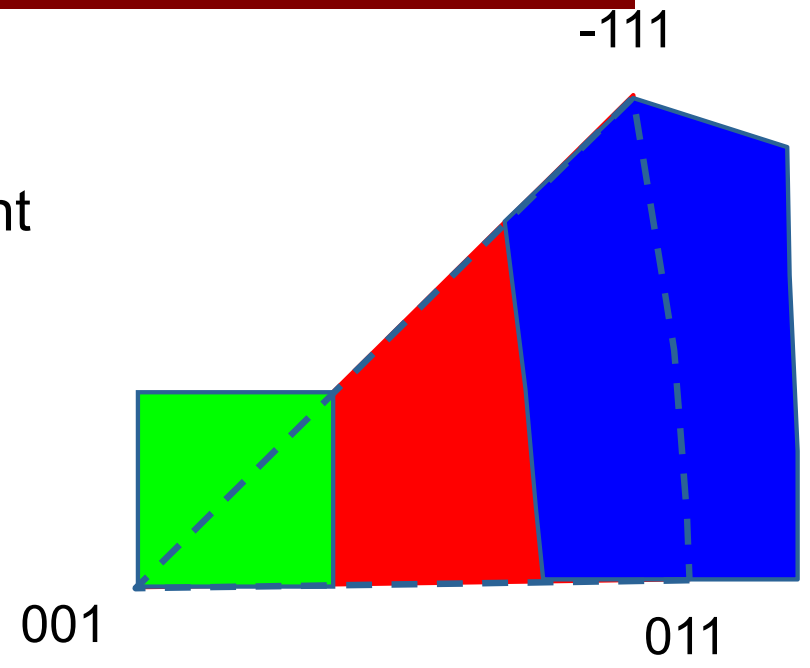
Sollicitation à 110 K

Sollicitation à 400 K



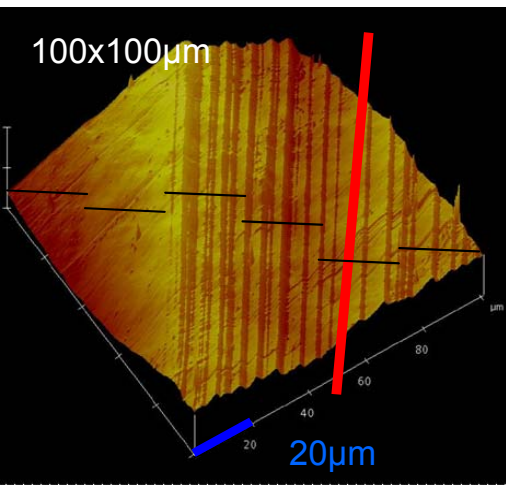
Observations expérimentales : plans de glissement

Activation de différents plans de glissement en fonction de la direction de traction

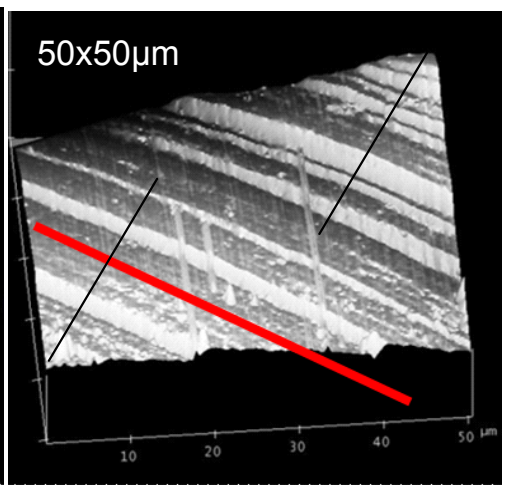


Observations in situ dans un AFM

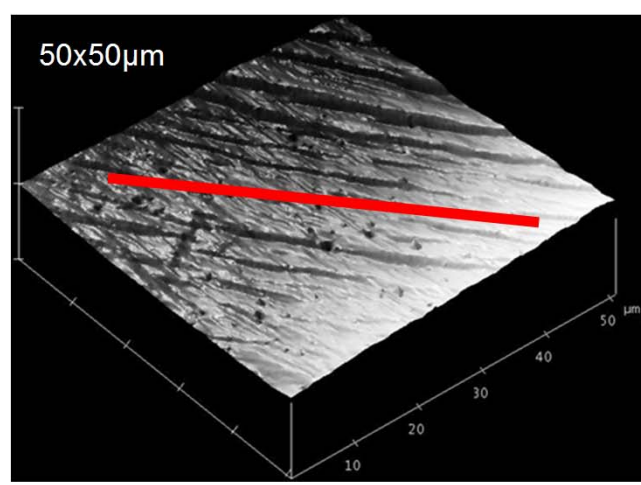
{111} Cu



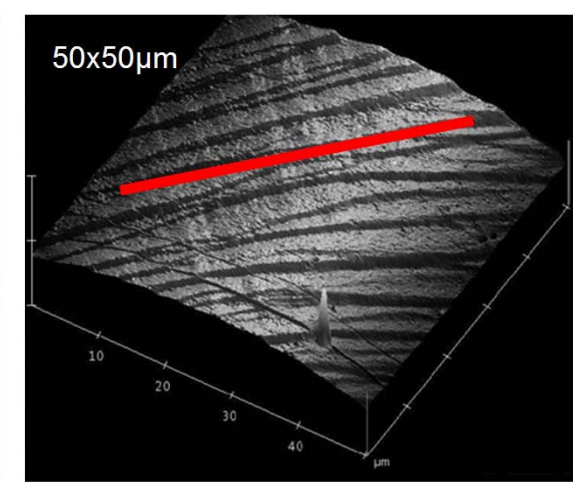
{110} Fe



{112} Fe



{112} Fe



Limitation par la puissance des calculs numériques

- Echelle atomique : caractérisation de la mobilité et interactions avec les défauts
- Echelle mésoscopique : détermination du comportement collectif des dislocations
- Echelle d'agrégats cristallins : comportement mécanique homogénéisé
- Echelle de la structure : prévision de la ténacité, durée de vie, etc...

Simulations de Dynamique Moléculaire (DM)

La Dynamique Moléculaire (DM) simule la réponse d'un ensemble d'atomes à une sollicitation imposée

- La limite d'élasticité est contrôlée par le mouvement des dislocations vis
- Le mouvement des dislocations vis est contrôlée par la germination de double décrochements
- La vitesse des dislocations vis est proportionnelle à leurs longueur

$$v(\tau, T) = Cl \exp\left(-\frac{\Delta G_o}{kT} \left(1 - \sqrt{\frac{\tau_{eff}}{\tau_o}}\right)\right)$$

Mouvement de dislocation vis à 200 K dans le fer en cisaillement simple

La Dynamique des Dislocations (DD) simule la réponse d'un ensemble de dislocations à une sollicitation imposée

$$v_{vis}(\tau, T) = Cl \exp\left(-\frac{\Delta G_o}{kT} \left(1 - \sqrt{\frac{\tau_{eff}}{\tau_o}}\right)\right)$$

[Naamane et al, IJP 2010]

$$v_{non-vis}(\tau, T) = \frac{B}{b} \tau_{eff}$$

Apport de la DD : équations constitutives

La Dynamique des Dislocations (DD) simule la réponse d'un ensemble de dislocations à une sollicitation imposée

$$v(\tau, T) = Cl \exp\left(-\frac{\Delta G_o}{kT} \left(1 - \sqrt{\frac{\tau_{eff}}{\tau_o}}\right)\right)$$

Relation d'Orowan $\dot{\gamma}^s = \rho_m^s b^s v^s$

Première équation constitutive :
L'équation d'écoulement

$$\dot{\gamma}_s = H l \exp\left(-\frac{\Delta G_o}{kT} \left[1 - \sqrt{\frac{\tau_{eff}}{\tau_o}}\right]\right)$$

$$\tau_{eff} = f(\tau_{app}) ?$$

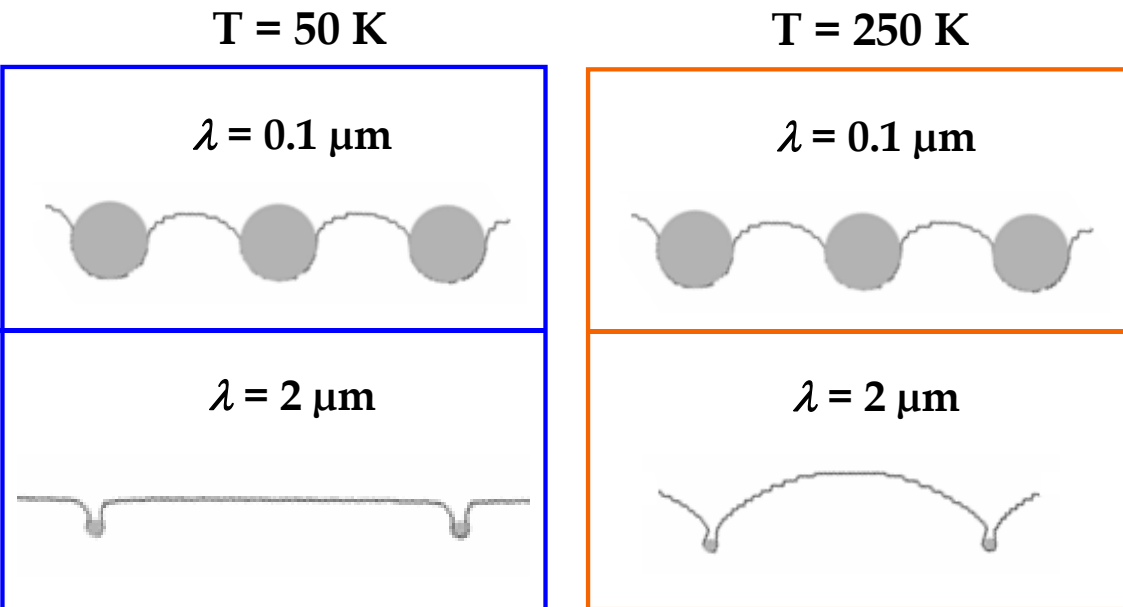
$$l = f(\text{microstructure}) ?$$

Décomposition de la contrainte

Effet de la microstructure

La DD permet de répondre à ces questions

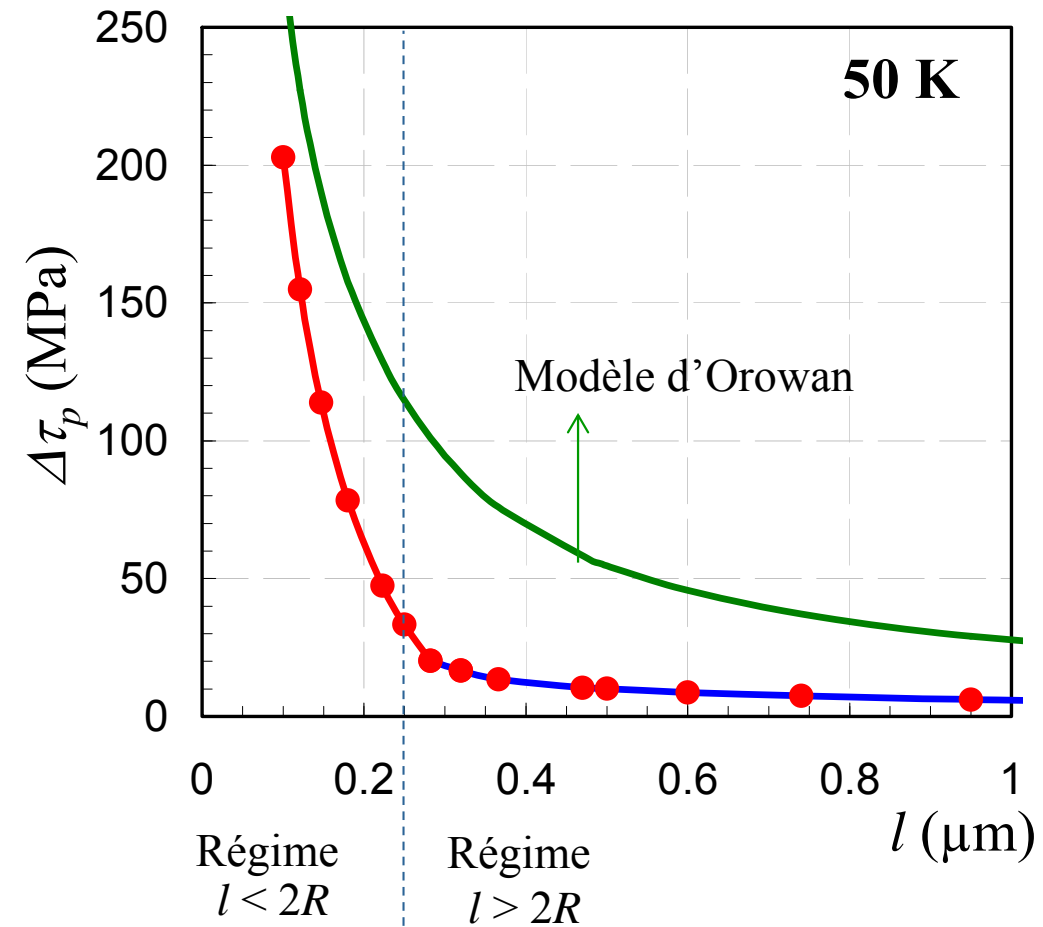
Résultats DD



Courbure des dislocations non-vis

$$R^s = \frac{\mu b}{\tau_{app}^s}$$

Durcissement d'Orowan

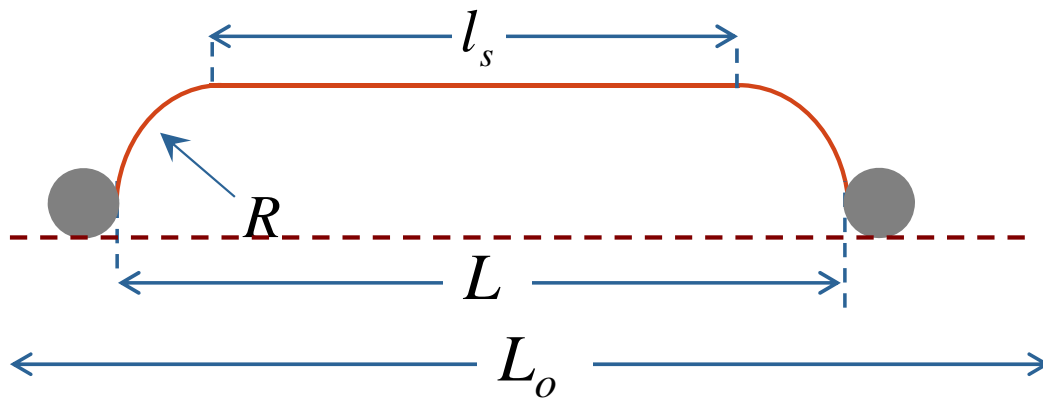


$$\Delta\tau_{orowan} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)\lambda} \ln\left(\frac{2\bar{D}}{b}\right)$$

Apport de la DD : Décomposition des contraintes

$$\dot{\gamma}_s = H l \exp\left(-\frac{\Delta G_o}{kT} \left[1 - \sqrt{\frac{\tau_{eff}}{\tau_o}}\right]\right)$$

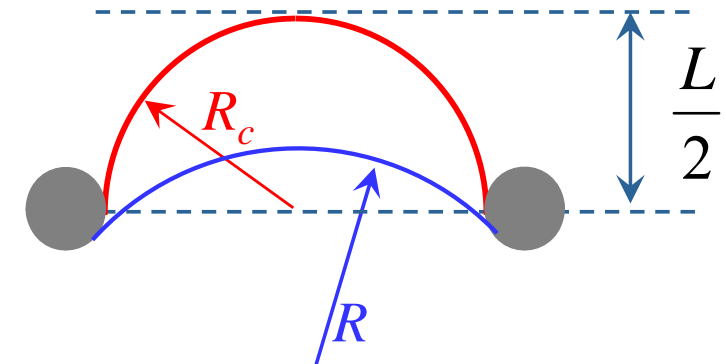
Grand espacement



$$\tau_{eff} = \tau_{app}$$

$$\Delta\tau = \Delta\tau_l \propto \ln \frac{l_s}{L_o}$$

Petit espacement



$$\tau_{TL} = \alpha\mu b \left(\frac{1}{\lambda^s} - \frac{1}{2\alpha R^s} \right)$$

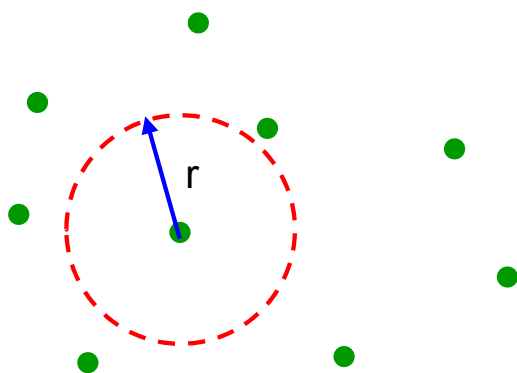
$$\tau_{eff} = \tau_{app} - \tau_{TL}$$

$$\Delta\tau = \Delta\tau_l + \Delta\tau_{TL}$$

[Monnet et al, Acta Mat, 2011]

Longueur moyen des segments vis

Mobilité isotrope

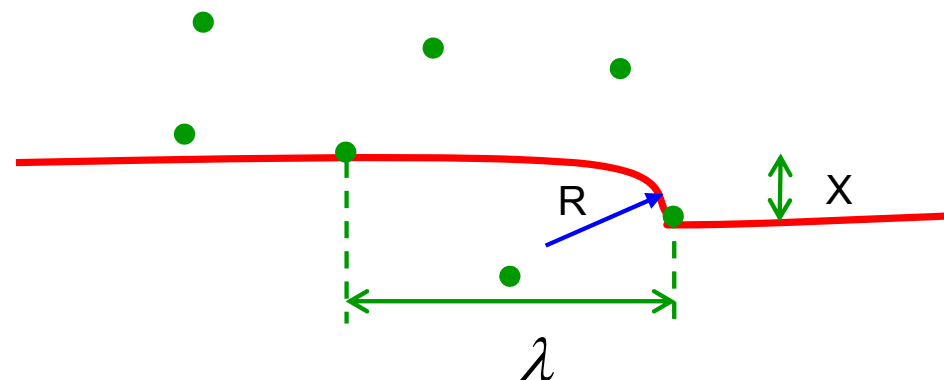


Distribution de Poisson – 2D

$$p(r) = 2\pi \rho r \exp(-\pi\rho r^2)$$

$$\lambda = \int_0^{\infty} 2\pi \rho r^2 \exp(-\pi\rho r^2) dr = \frac{1}{\sqrt{\rho}}$$

Dislocations vis rigide



Distribution de Poisson – 1D

$$p(\lambda) = X\rho_{obs}^s \lambda \exp(-X\rho_{obs}^s \lambda) d\lambda$$

$$\lambda = \frac{1}{2R\rho} \quad \text{with } R = \frac{\mu b}{\tau_{eff}}$$

Equations constitutives : la loi cristalline

- Cission appliquée sur le système
- Equation d'écoulement
- Espacement moyen d'obstacles
- Longueur moyenne des segments vis
- Contribution de la tension de ligne
- Décomposition des contraintes

$$\tau_{app}^s = (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \vec{n}^s) \cdot \vec{b}^s$$

$$\dot{\gamma}^s = H l_{sc}^s \exp\left(-\frac{\Delta G_o}{kT} \left(1 - \sqrt{\frac{\tau_{eff}^s}{\tau_o}}\right)\right)$$

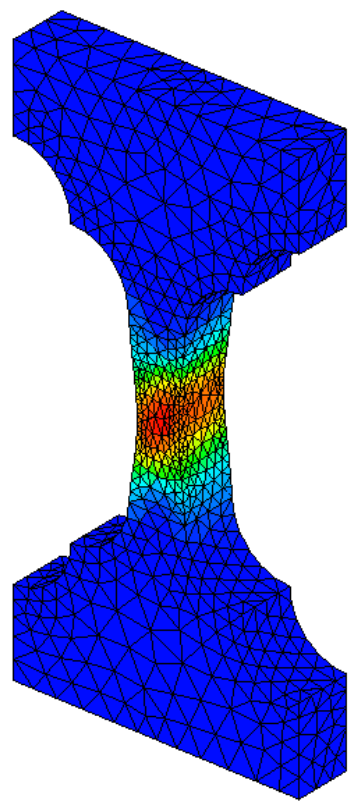
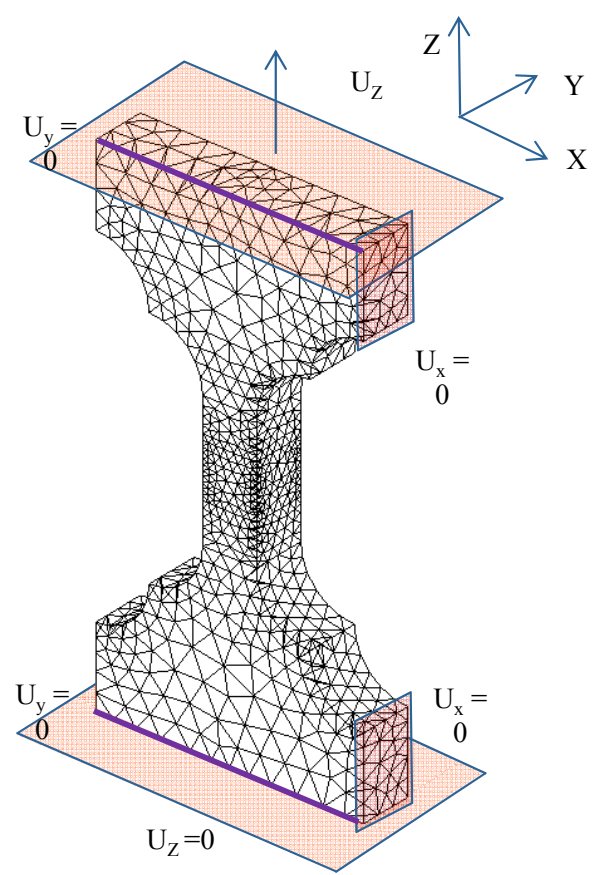
$$\lambda^{-1} = \min(\sqrt{\rho}; (D + 2R)\rho)$$

$$l^s = \lambda^s - 2\alpha R^s$$

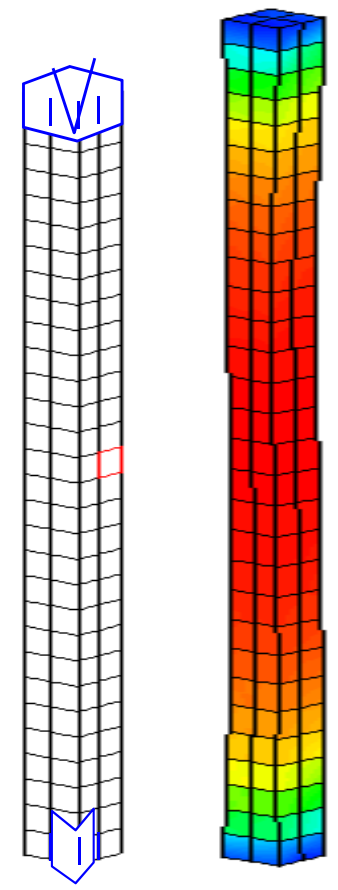
$$\tau_{TL}^s = \max\left[0; \alpha\mu b \left(\frac{1}{\lambda^s} - \frac{1}{2\alpha R^s + l_c}\right)\right]$$

$$\tau_{eff}^s = \tau_{app}^s - \tau_{TL}^s$$

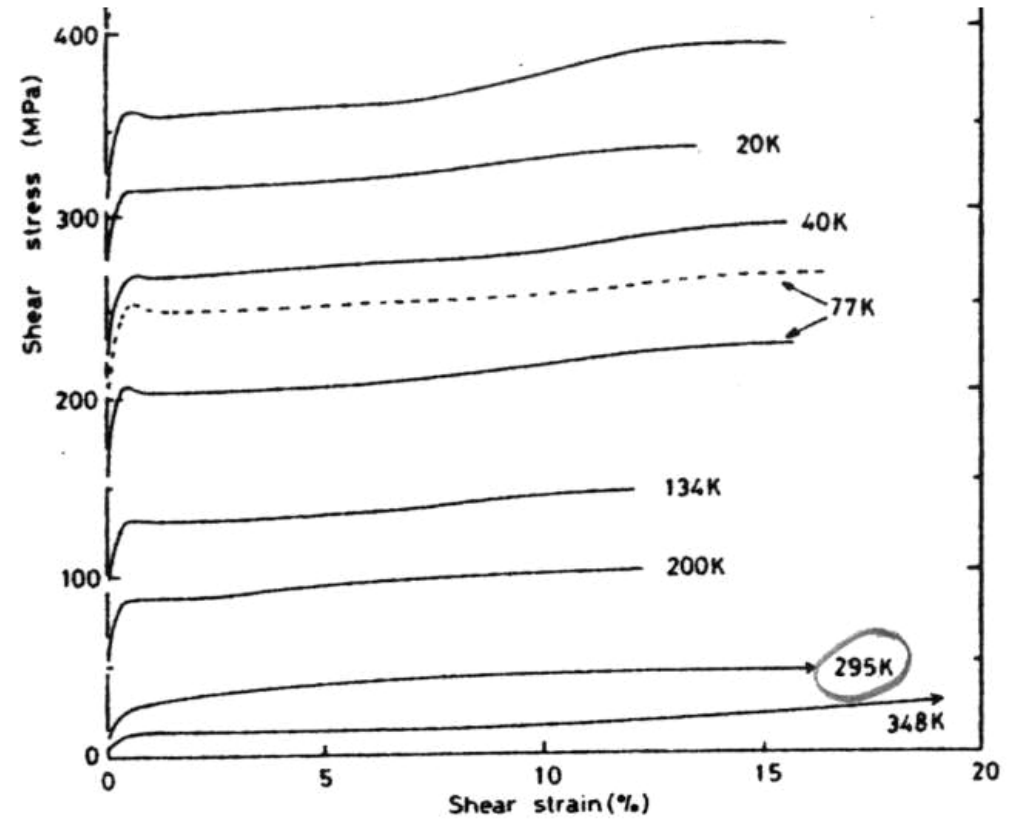
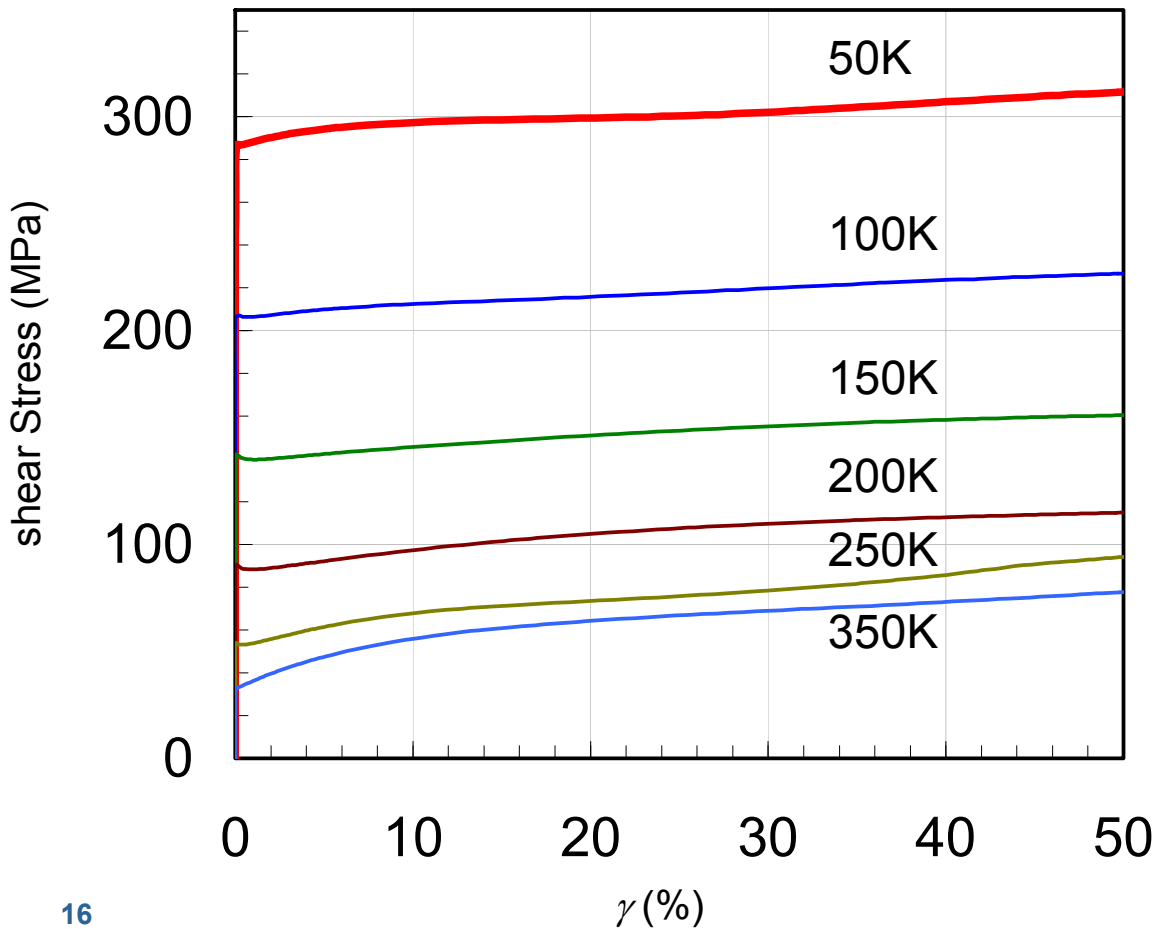
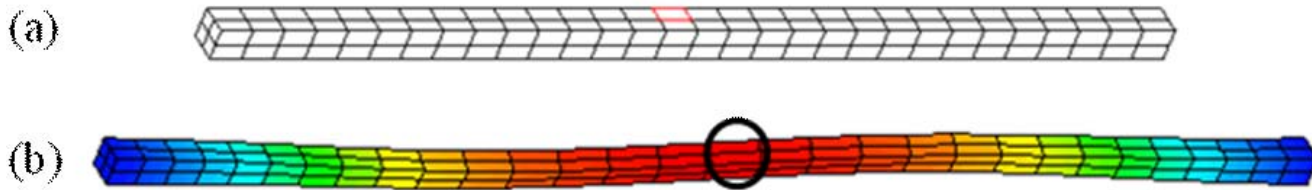
Validation par simulations d'éléments finis



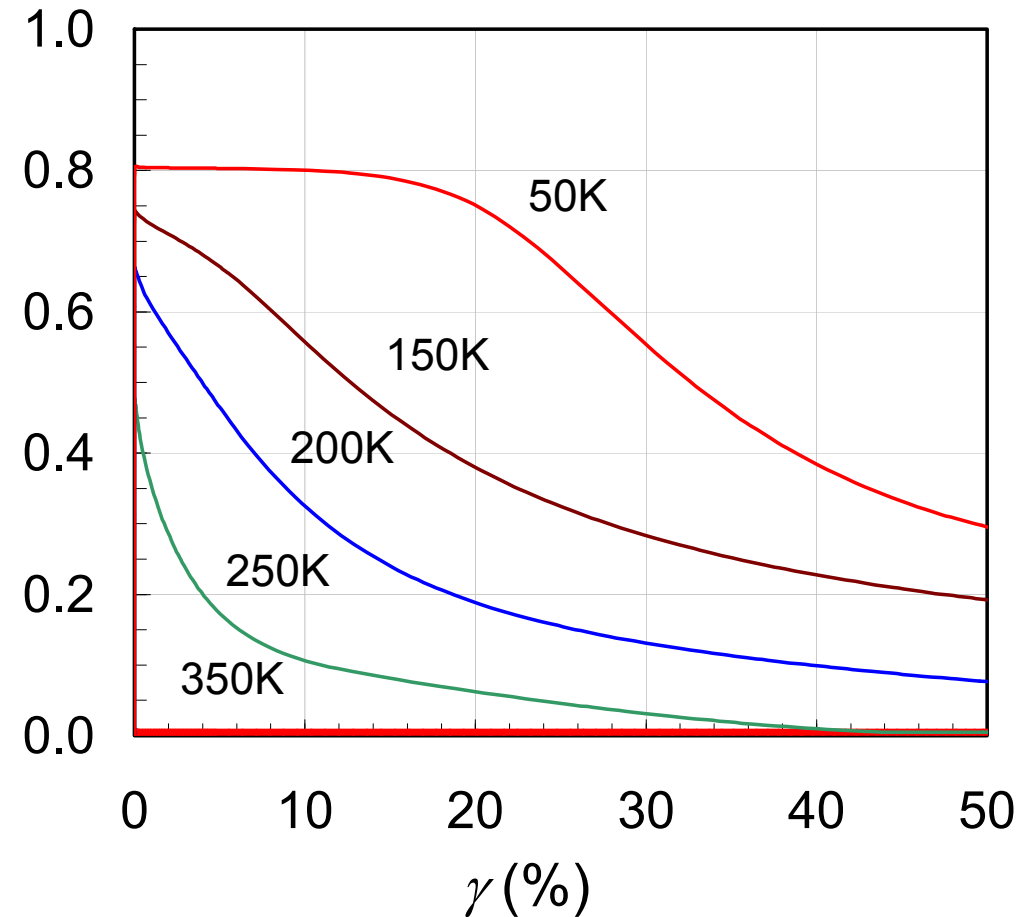
Déformation d'une éprouvette de traction de fer monocristallin



Déformation d'une poutre de fer monocristallin

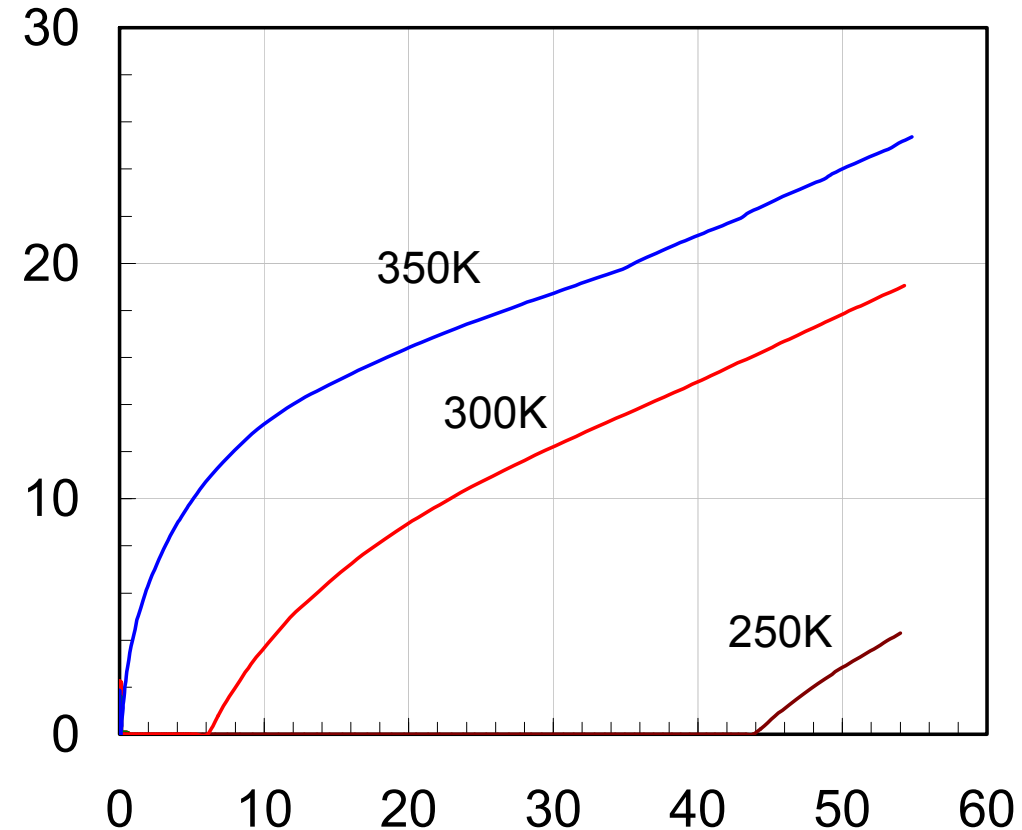


Longueur des segments vis l (μm)



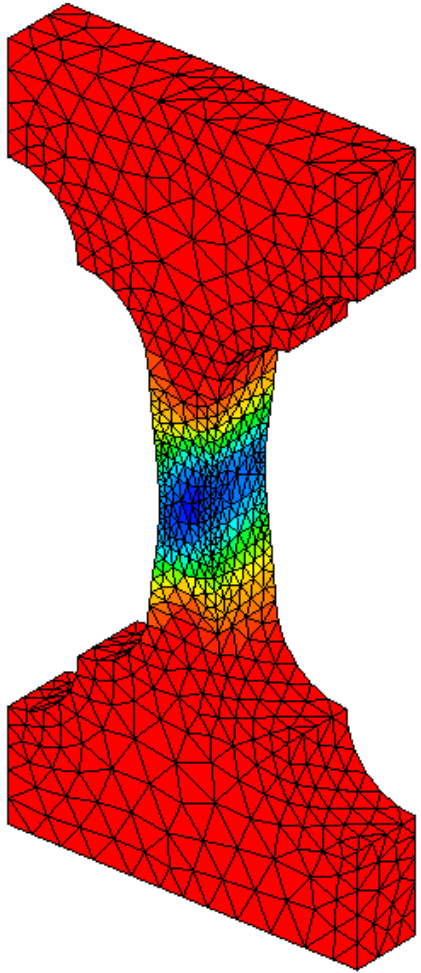
Ecrouissage induit par effet de longueur

Durcissement athermique τ_{TL} (MPa)

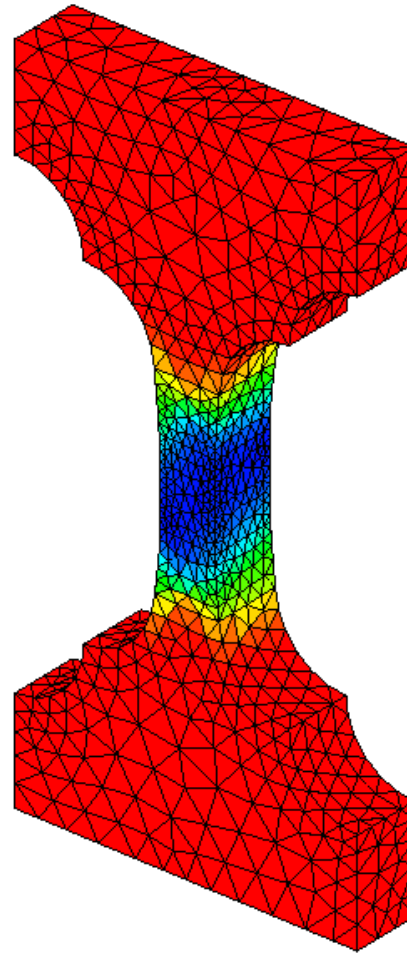


Ecrouissage induit par la tension de ligne

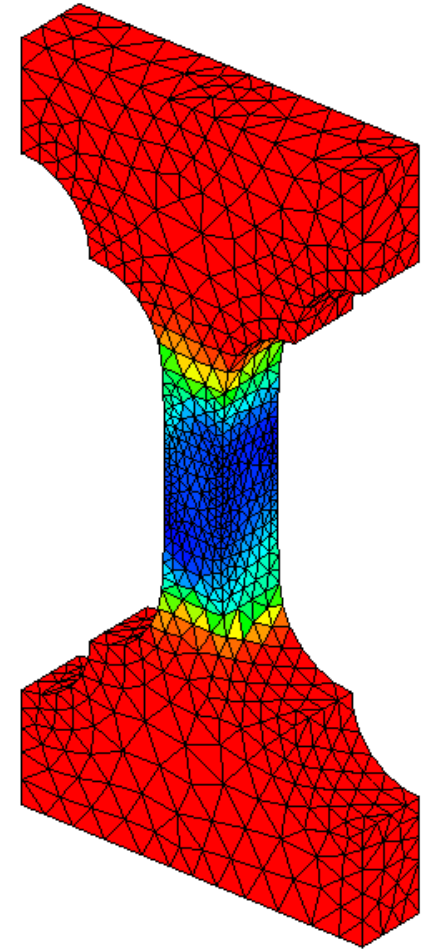
Localisation de la déformation



100 K

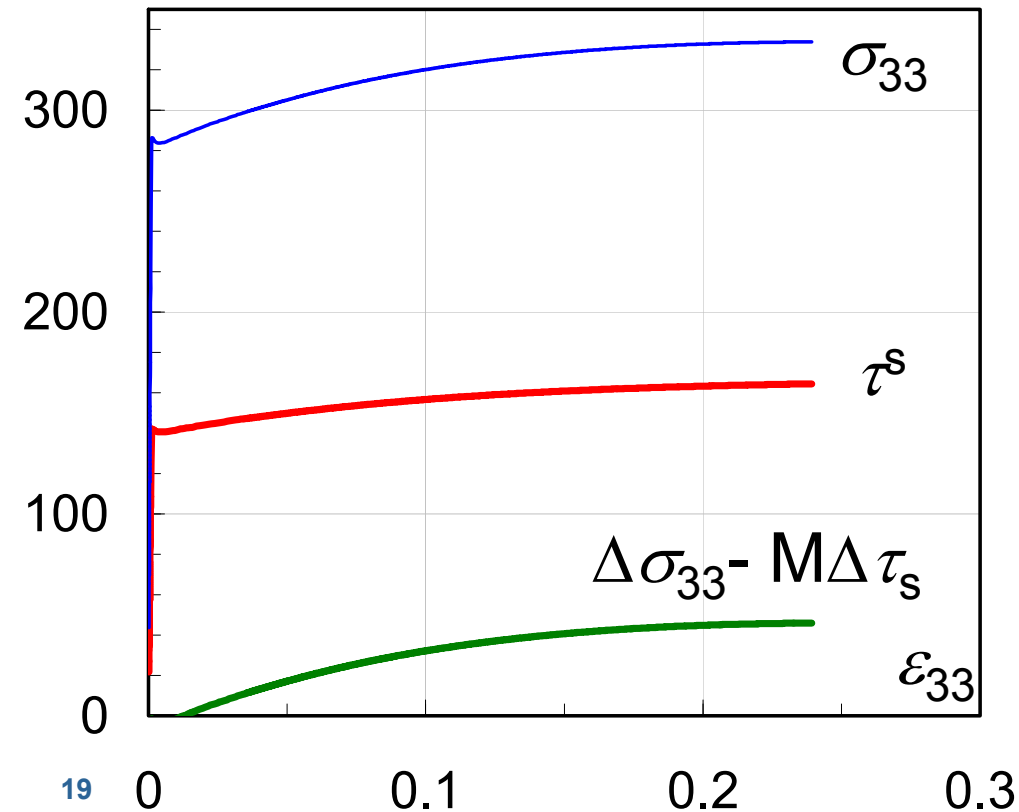


200 K

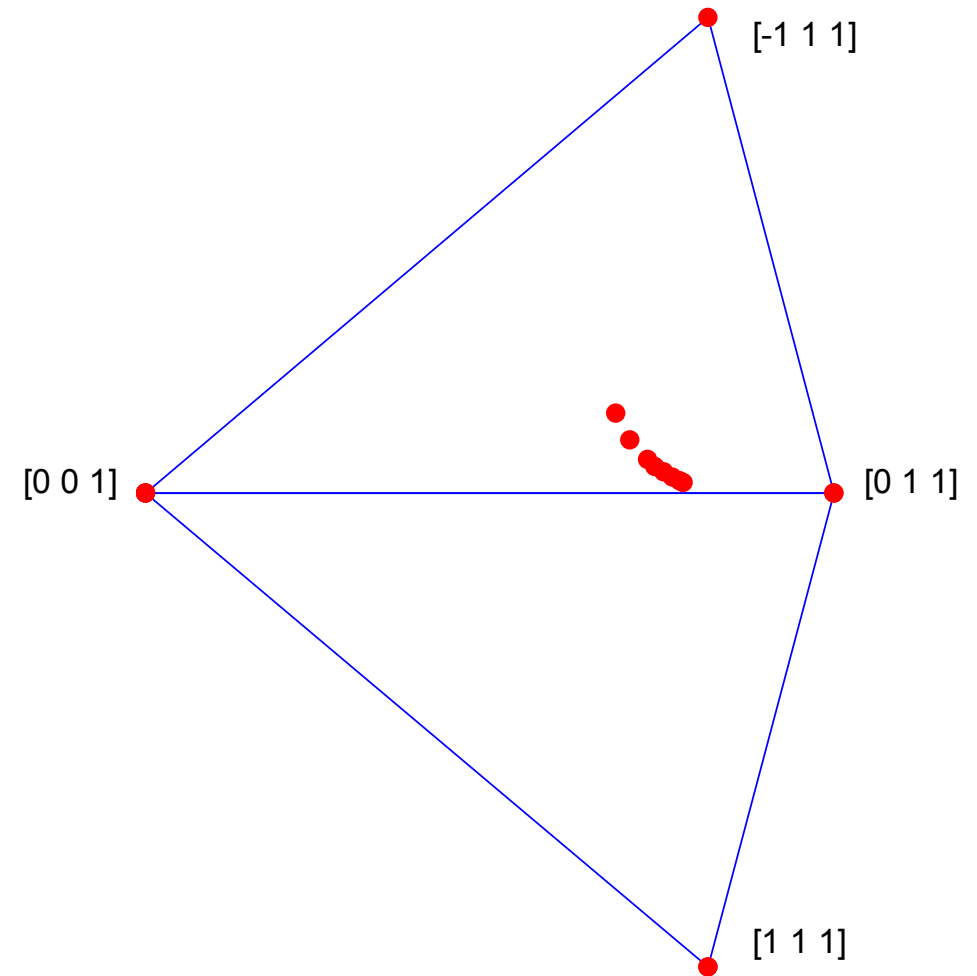


300 K

- Simulation d'essais de traction
- Orientation initiale [-1 5 9]
- Température de simulation: 150K

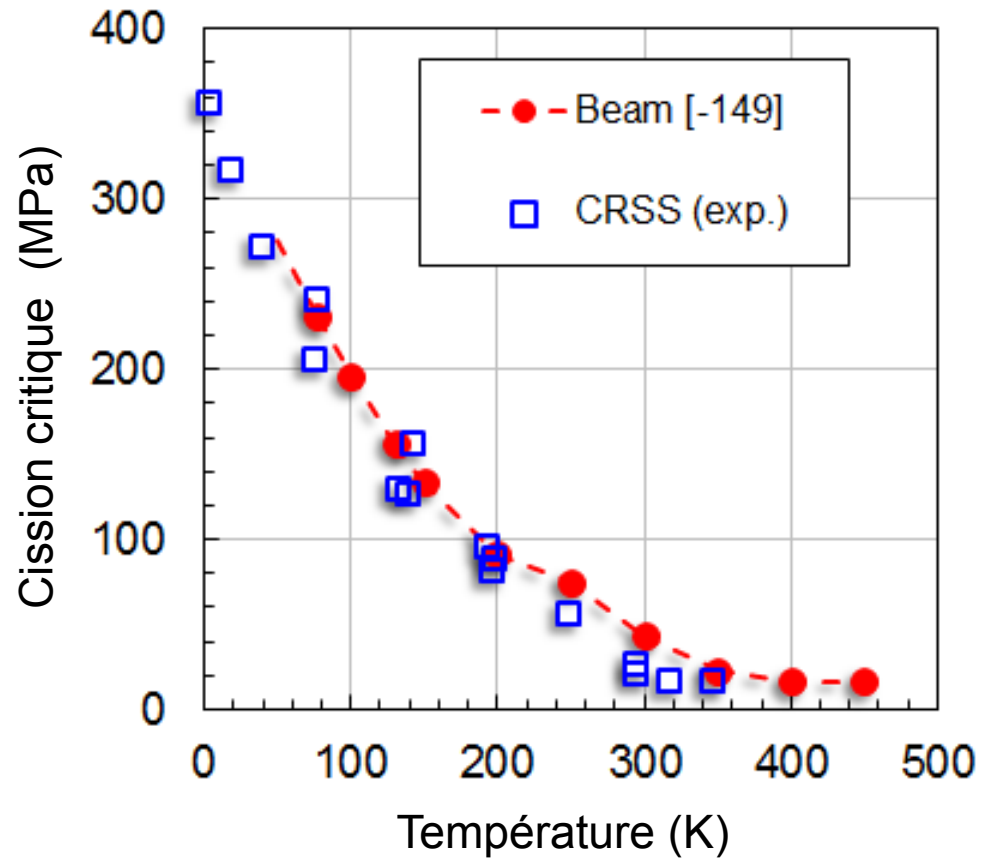


Rotation cristallographique

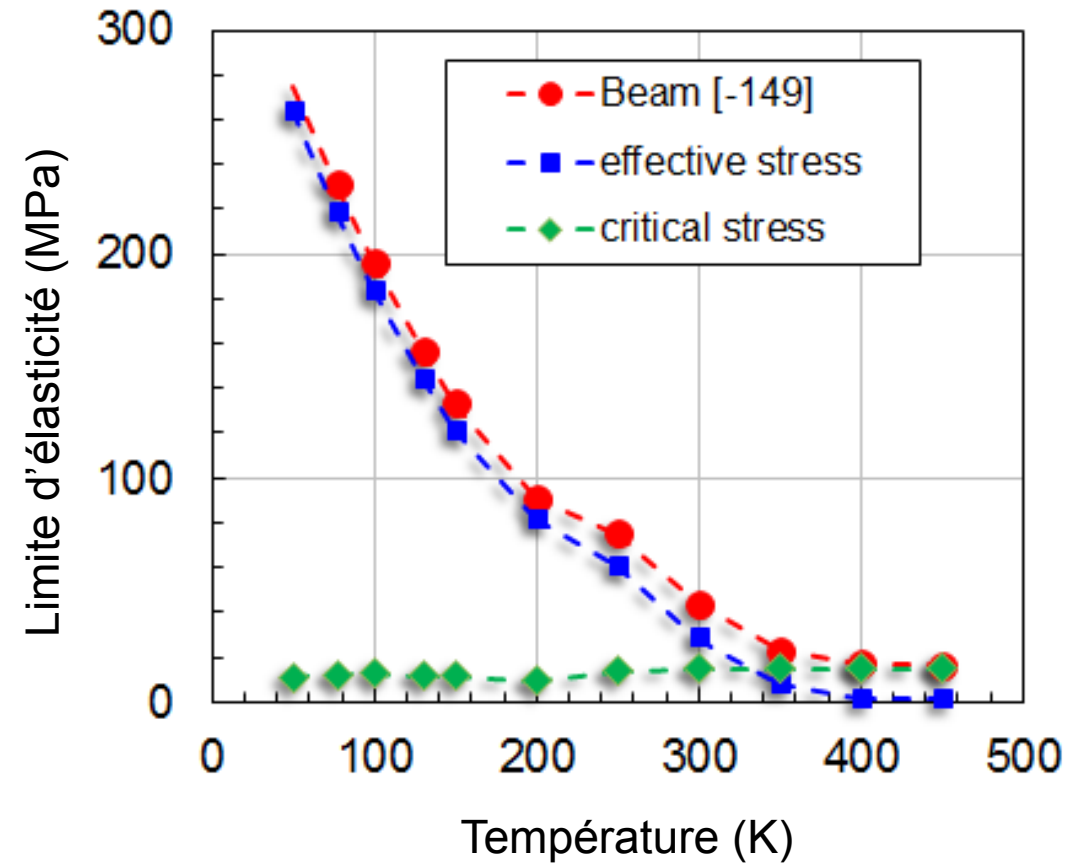


Axe de traction dans le triangle standard

Comparaison avec l'expérience



Décomposition de contraintes

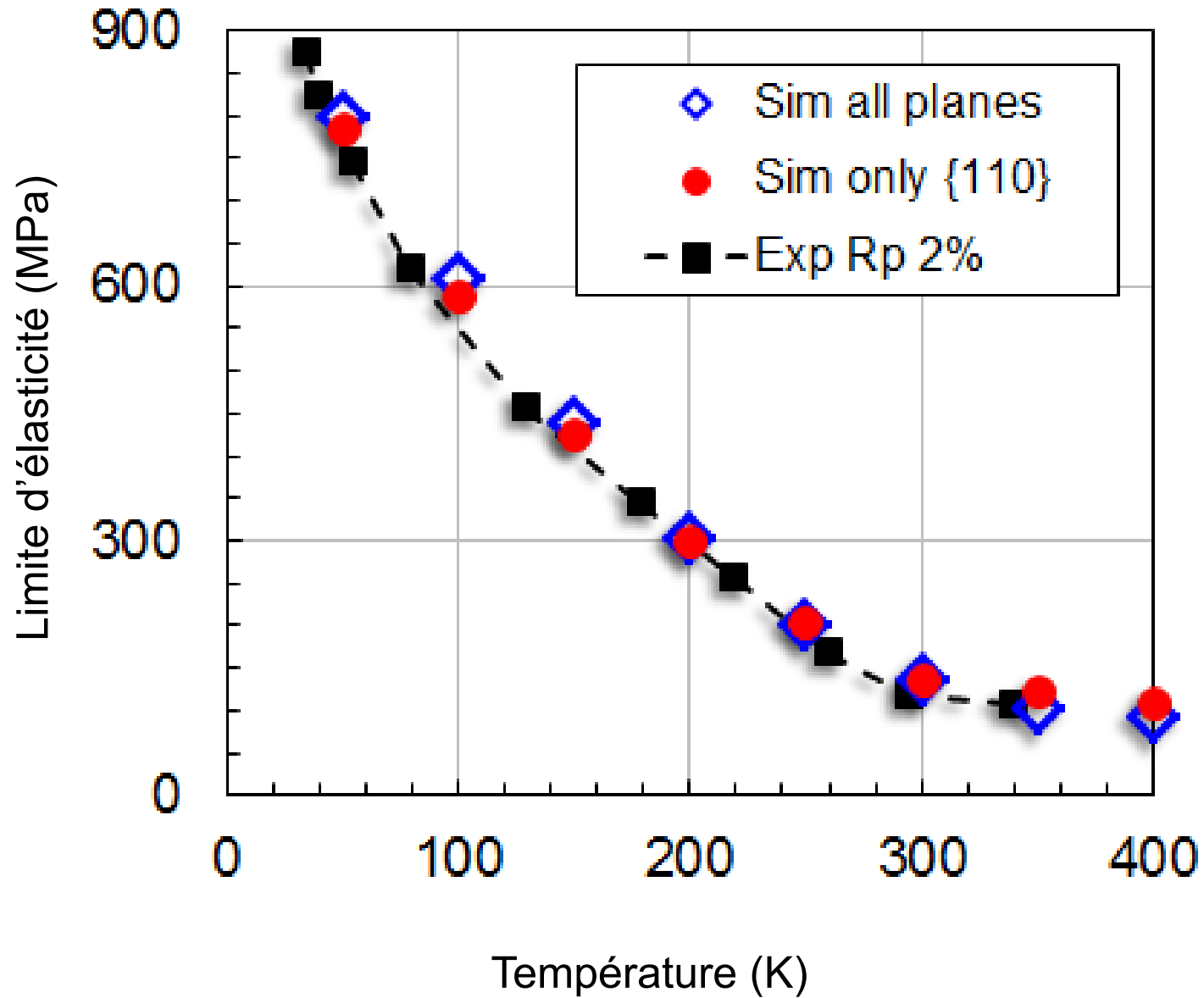


[Spitzig et al, Mater. Sci. Eng. 1973]

[Quesnel et al. Mater. Sci. Eng. 1975]

[Kuramoto et al. Scripta. Metall. 1979]

Polycristaux de fer pur à gros grains



- Il est possible d'établir une loi cristalline fondée sur la physique de glissement
- La modélisation multiéchelles permet de construire une chaîne de connaissances à toutes les échelles
- L'écoulement plastique dans les aciers est contrôlé par le mouvement des dislocations vis
- L'écrouissage augmente avec la température
- Seulement les obstacles à forte densité induisent un durcissement athermique

- Isoler la composante cinématique de la composante isotrope de l'érouissage
- Déterminer la composante non local du comportement
- Écrire l'équation constitutive de l'effet des joints de grains (Hall-Petch)