

Etude par essais in situ MEB et AFM sur monocristaux des mécanismes de glissement à température ambiante de la ferrite de pureté commerciale.

PREAMBULE

Beaucoup d'aciers sont des matériaux multiphasés, dont souvent la ferrite ou fer alpha, de structure CC cubique centrée, est un constituant important sinon le principal. C'est le cas notamment des aciers des cuves des centrales nucléaires du parc français dont EDF est le maître d'œuvre. Afin de bien comprendre comment ces aciers vont évoluer au cours de la durée de vie des installations, et de savoir le prévoir au mieux, il est important de connaître précisément les mécanismes élémentaires de la plasticité dans les diverses phases métalliques constitutives des structures. Or la plasticité des métaux CC et en particulier de la ferrite reste pour une large part insuffisamment comprise. Ce qui justifie, aux plans théorique et applicatif, les études diverses consacrées à l'amélioration de cette compréhension parmi lesquelles ce travail s'inscrit. Ce travail a bénéficié d'un soutien financier de la part de EDF R&D.

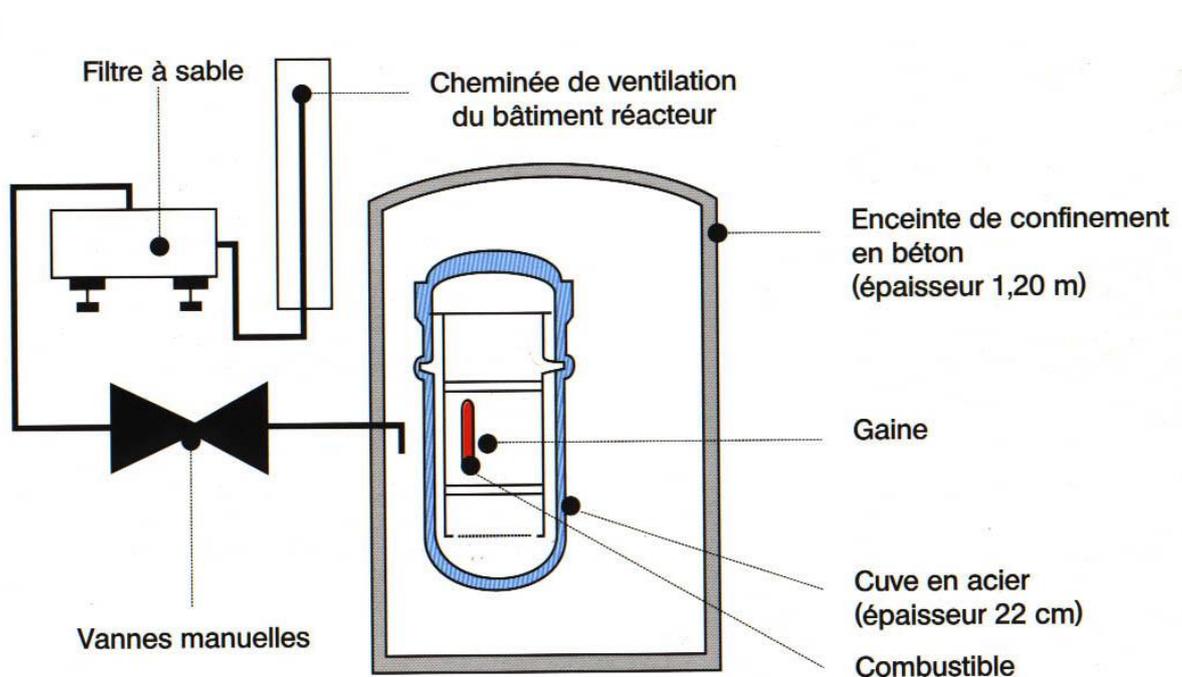


Schéma de structure d'une centrale nucléaire

INTRODUCTION

La déformation des métaux est étudiée depuis des siècles, en fait depuis que l'on s'en sert pour fabriquer des ustensiles et des outils de toutes natures, des armures et des armes, et on sait depuis longtemps que les métaux sont constitués de grains de taille très variables, certains étant visibles à l'œil nu, d'autres pouvant être seulement de quelques centaines ou dizaines de nanomètres. Ces grains sont des cristaux, et la compréhension de la mécanique des métaux doit beaucoup aux études des minéraux qui ont permis le développement de la cristallographie. A la fin du 19^{ème} siècle, lorsque Röntgen découvre le rayonnement X et que quelques années plus tard Von Laue le caractérise, la détermination des structures cristallines de multiples matériaux fait l'objet d'intenses études expérimentales et théoriques. Alors que la plasticité des métaux est déjà abondamment examinée de manière phénoménologique dans le cadre de la rhéologie et de la mécanique des milieux continus, la relation de la déformation des métaux avec leur structure cristallographique pour comprendre les mécanismes élémentaires va devenir un domaine scientifique essentiel constituant les racines de la mécanique des matériaux d'aujourd'hui.

Les études de cristallographie et de la diffraction du rayonnement X par les cristaux ont notamment introduit de nombreuses représentations des structures atomiques, aide essentielle à la compréhension des mécanismes de déformation, de consolidation, de rupture, des cristaux : au premier rang, les projections stéréographiques et les figures de pôle permettent de représenter dans l'espace l'orientation d'un grain ou d'un ensemble par rapport à un repère donné et de suivre les éventuels changements après déformation. L'usage de ces représentations étant présent tout au long de ce travail, ils feront l'objet d'une présentation au chapitre I.1 des rappels.

Un métal est donc une structure hétérogène puisque constituée d'un grand nombre de cristaux, et c'est une structure généralement anisotrope même si une quasi isotropie peut-être atteinte lorsque les cristaux sont aléatoirement orientés dans toutes les directions de l'espace. Chaque cristal, s'il était parfait, serait un milieu homogène, mais néanmoins anisotrope également car tous les réseaux cristallins ont une symétrie particulière qui marque les propriétés mécaniques. Cette anisotropie des propriétés mécaniques liée à la structure cristalline, d'intensité variable d'un cristal de métal à un autre d'une même symétrie, est non résorbable. Un cristal a un comportement élastique jusqu'à une certaine contrainte appliquée et peut se déformer plastiquement si cette contrainte est atteinte puis augmentée au-delà. Si un cristal était parfait cristallographiquement, c'est-à-dire si son réseau atomique ne contenait aucune imperfection, il faudrait une contrainte considérable pour le déformer plastiquement, bien supérieure aux contraintes constatées expérimentalement. On sait que ce sont les imperfections de la structure cristalline des cristaux qui permettent sa déformation plastique à partir de contraintes variables selon la quantité et la nature des défauts : les défauts cristallins sont

ponctuels (lacunes, atomes d'impuretés), linéaires (dislocations) ou surfaciques (disclinations, sous-joints, macles). Ces défauts sont aussi très inter-corrélés (impuretés ségréguées sur les dislocations, parois de dislocations formant les sous-joints, etc).

La compréhension des mécanismes de déformation plastique des cristaux métalliques vient des études, théoriques et expérimentales, du comportement des défauts en présence d'une sollicitation, mécanique, thermique ou autre (irradiation par exemple). Les monocristaux se déforment en faisant intervenir essentiellement 4 mécanismes, plus ou moins actifs selon les régimes de température, de vitesse de déformation et bien sûr selon le type de structure. Ces mécanismes sont de contributions variables dans la déformation globale. Ce sont essentiellement des mécanismes liés aux mouvements des défauts, directement ou indirectement : directement, ce sont la diffusion pour les défauts ponctuels, le glissement pour les dislocations (ou la montée combinée à la diffusion), la mobilité (migration) des sous-joints, le glissement étant le mécanisme essentiel ; indirectement, on peut citer le maclage, qui opère généralement lorsque le glissement n'est pas suffisamment disponible. S'ajoutent à ces mécanismes, les mécanismes de déformation par transformation de phase peuvent être très importants pour certains métaux et alliages.

Pour la plupart des métaux, la plasticité est dominée dans un large domaine de température, de vitesse de sollicitations, de conditions d'essais diverses, par le glissement cristallin, provenant du mouvement des « lignes » dislocations dans leur(s) plan(s) de glissement et selon la direction de la faute d'empilement qu'elles portent. Les rappels dont nous aurons besoin concernant la mobilité des dislocations sont reportés au chapitre I.2.

L'étude des mécanismes de la plasticité cristalline, identification des plans et directions de glissement et leurs caractéristiques, s'est appuyée jusqu'aux années 1990 essentiellement sur l'association d'essais mécaniques complétés de caractérisation microstructurale et de déductions théoriques testées en simulations numériques pour tester les interprétations et modèles proposés. L'avènement des calculs en dynamique des dislocations (DD) et en dynamique moléculaire (DM), a apporté une aide déterminante en permettant de faire des identifications plus fines de mécanismes élémentaires de mobilité de dislocations, de mécanismes de glissement et de lois de comportement plastique.

La présentation des différents systèmes (plans et directions) de glissement possibles selon les principales structures des métaux est faite dans de nombreux ouvrages et travaux. Nous présentons au chapitre I.3 les systèmes avérés ou susceptibles d'opérer dans les structures cubiques CFC et CC, en incluant le cas échéant les clarifications apportées par les simulations numériques.

Sur le plan expérimental, les essais mécaniques in situ ont permis d'affiner les observations et la caractérisation des essais : un essai mécanique sur un monocristal vise à identifier les mécanismes de glissement s'activant pour diverses orientations de sollicitations et à déterminer les contraintes d'activation de ces systèmes ainsi que l'évolution de ces contraintes pour le maintien en activation de ces systèmes, ou d'autres venant se substituer aux premiers au cours de la déformation. Ces essais permettent d'analyser les deux éléments essentiels constitutifs de la plasticité : le critère de plasticité (la limite élastique initiale et son évolution) et la loi d'écoulement plastique (la consolidation, l'écrouissage).

Le critère de plasticité s'appliquant largement à de nombreux monocristaux métalliques, de structure CFC avant tout mais au-delà également, est le critère de Schmid que nous présentons au chapitre I.4 des rappels, avec certaines des variantes dont il a fait l'objet. Ce critère est souvent considéré aujourd'hui plus comme l'exception que la règle, notamment pour l'activité du glissement dans la structure CC dont les investigations montrent parfois des écarts à la loi de Schmid qui questionnent la validité de celle-ci. Ces écarts seront discutés dans le présent travail.

Le critère d'activation d'un ou plusieurs systèmes de glissement une fois atteint, la mobilité collective des dislocations s'exprime par le glissement, dont la cinématique obéit également à quelques règles géométriques qui serviront à l'examen des résultats tout au long de ce travail. Le chapitre I.5 résume les principales caractéristiques géométriques du glissement.

La loi d'écrouissage des métaux, et donc des monocristaux a elle aussi fait l'objet de très nombreuses études. En régime athermique, un consensus assez large s'accorde sur la forme de loi s'appliquant à l'échelle des systèmes de glissement, en termes de densités de dislocations obstacles. Elle est plutôt bien corroborée par les simulations de DD, là encore pour la structure CFC d'abord, du fait de sa relative simplicité, mais avec une validité résistante aussi pour les autres structures importantes comme CC et HC (hexagonale compact).

La loi d'écrouissage « générique » du monocristal en régime athermique, est présentée au chapitre I.6 des rappels, avec quelques une de ses variantes intéressant les structures CFC et CC, et les apports récents venus des simulations de DD, notamment à propos des libres parcours moyens qui sont une caractéristique essentielle de l'écrouissage. Enfin, pour terminer ces rappels, le chapitre I.7 résumera les équations constitutives pour la modélisation de la plasticité des monocristaux telles que nous les utiliserons, avec quelques apports, pour des confrontations à nos essais in situ.

La comparaison des deux structures cubiques CFC et CC permet de fixer les principaux points de la problématique du présent travail :

- Alors que l'on sait depuis un siècle au moins que le principal glissement dans les cristaux métalliques CFC opère sur les plans denses (111) et suit les directions denses $\langle 110 \rangle$ dans une large

gamme de températures et de situations, la polémique à propos des mécanismes opérant dans les cristaux CC n'est pas encore close : le glissement est-il ou non cristallographique ou bien suit-il l'orientation du plan de cisaillement maximum, observe-t-on une ou des familles de plans cristallins identifiés ou bien n'est-on en mesure que de seulement fixer les directions du glissement, qui s'avèrent les directions denses $\langle 111 \rangle$?

- Si la loi de Schmid s'avère bien rendre compte du comportement plastique pour la structure CFC, c'est loin d'être toujours le cas pour la structure CC, en partie du fait des interrogations sur les mécanismes élémentaires. Cette loi est-elle en défaut ou n'est-ce que son contexte est plus complexe?

- La loi d'écrouissage pour un monocristal s'établit à l'échelle des populations de dislocations interagissant, elles-mêmes liées aux mécanismes élémentaires de la plasticité. Sa forme pour la structure CC est donc elle aussi assujettie à la clarification des mécanismes élémentaires de mobilité, de déviation et d'intersection des dislocations dont la structure de cœur multi-planaire complique énormément les scénarios. Peut-on encore concevoir des systèmes de glissement indépendants dans ces conditions?

Le présent travail est une nouvelle exploration expérimentale de cette problématique après presque trois décennies de pause durant laquelle les simulations numériques DD et DM ont considérablement éclairé la complexité de la plasticité des cristaux cubiques, CFC notamment et dans une moindre mesure CC. En revisitant les comportements en situations déjà étudiées autrefois avec les moyens expérimentaux d'aujourd'hui et l'appui des apports des simulations numériques aux échelles fines, le travail s'efforce d'apporter des éléments de réponse, pour l'ingénieur comme pour le chercheur, à ces questions toujours ouvertes. Il s'appuie sur des essais menés in situ en microscopie électronique à balayage (MEB) et en microscopie à force atomique (AFM). Les essais sont menés sur des monocristaux de ferrite élaborés au sein du laboratoire selon la technique de l'écrouissage critique. Quelques essais menés sur monocristaux de cuivre (élaborés au laboratoire également, par méthode Bridgman) ont servi de mise au point du protocole mais seules quelques observations micrographiques qualitatives seront utilisées et reportées à titre de comparaison.

Les essais en MEB, traction et compression, associent la détermination de la réponse force-déplacement et contrainte-déformation associée, le suivi des faciès de glissement et le suivi des rotations cristallines par technique EBSD ; les essais en AFM, en traction uniquement, associent l'acquisition de la réponse force-déplacement et contrainte-déformation associée, le suivi et le post-traitement en analyse d'images des évolutions du glissement.

Quelques essais conventionnels ont servi de contrôle.

A l'analyse de ces essais s'ajoutent plusieurs travaux de simulation : les principaux, à l'aide d'un code spécifiquement créé à ce propos (implémentation Matlab) concernent les vérifications de

cohérence des résultats obtenus (limite d'élasticité, systèmes actifs, rotations de réseau, taux d'écrouissage) en regard des connaissances théoriques actuelles sur la loi de comportement, notamment émanant des approches en DD de la plasticité ; la limite d'élasticité a fait l'objet d'une analyse spécifique dans la mesure où plusieurs caractéristiques des cristaux CC sont susceptibles de rendre cette limite très dépendante de l'orientation et du signe de la sollicitation ; l'influence des précipités de carbone présents dans nos monocristaux de ferrite de pureté commerciale sur la contrainte d'écoulement a été étudiée à l'aide du code micromegas de DD avec lequel le déplacement d'une dislocation dans diverses populations de précipités a été simulé ; enfin, l'analyse topographique quantitative de la cinématique du glissement à partir des séries micrographiques obtenues lors des essais in-situ en AFM a été effectuée sur quelques éprouvettes.

Ma part de travail personnel dans ce programme est constituée d'une participation à l'élaboration des monocristaux de Fer, du travail de sélection des orientations cristallines d'essais par rapport aux objectifs, de la préparation délicate des éprouvettes pour suivi des glissements et acquisition d'images, de la réalisation des essais in-situ MEB, de la participation aux essais in-situ AFM, du développement du code de simulation de plasticité implémenté avec Matlab, de la mise au point du code DD micromegas pour l'examen des lois d'interactions dislocations/précipités.

Je remercie :

- Marie-Hélène Chavanne pour l'élaboration des monocristaux (Fe et Cu), leur découpe par électro-érosion et leur orientation par méthode de Laué ;
- Eric Ait pour le pilotage des essais in situ AFM et la saisie des images pour le post traitement ;
- Thierry Chauveau pour les mesures de densités de dislocations et pour les discussions très utiles à leur propos,
- Sylvain Quereau pour ses explications précieuses à propos de la modélisation DD de la plasticité,
- Charlie Kalhoun pour avoir appliqué et étendu son approche de traitement du glissement émergent à mes images sur Fe et mené une analyse topologique fine du glissement,
- le Professeur Daniel Caillard pour m'avoir gentiment fourni quelques observations MET des cristaux étudiés, ayant permis l'évaluation de la densité de carbures présents,
- Ghiath Monnet, EDF, R&D, LMM, pour son co-encadrement dans le travail notamment sur le code DD MicroMegas et ses encouragements tout au long de la thèse,
- Patrick Franciosi pour son encadrement et son aide tout au long de ce travail,
- EDF R&D pour le soutien financier à l'étude menée,
- Le Laboratoire LSPM pour m'avoir fourni la possibilité de mener l'étude.

Le travail effectué est présenté (*voir sommaire détaillé*) en six chapitres encadrés de l'introduction et de la conclusion. Les **chapitres III** et **V** sont pour l'essentiel les textes d'articles à paraître (2013) respectivement dans les revues *Phil Mag* et *Acta Mater*. La partie principale du travail constitue le chapitre IV présenté en large part au symposium 'Plasticity' 2013 (invited keynote lecture) et en préparation pour soumission dans *Int. J. Plast.*

Table des matières

Le chapitre I : Rappels généraux utiles en plasticité cristalline	11
- I.1. Projection stéréographique, figure de pôle, figure de pôle inverse	11
- I.2. La mobilité des dislocations	14
- I.3. Les mécanismes de glissement pour les structures CFC et CC	19
- I.4. La loi de Schmid et les critères principaux de plasticité cristalline	30
- I.5. Caractéristiques géométriques du glissement cristallographique	40
- I.6. La loi d'écroutissage des monocristaux déformés par glissement	43
- I.7. Les équations constitutives du comportement élastoplastique du monocristal	52
- I.8. Références du chapitre I	59
Le chapitre II : Méthodologie expérimentale sur monocristaux Cu	63
- II.1. Préparation des éprouvettes d'essais	63
- II.2. Protocole d'essais in situ MEB	73
- II.3. Protocole d'essais in situ AFM	75
Le chapitre III : Ecarts à la loi de Schmid dans les cristaux CC	79
- III.1. Résumé français et texte anglais de l'article à paraître dans Phil. Mag.	79
- III.2. Références du chapitre III (références de l'article)	108
Le chapitre IV : Analyse les résultats expérimentaux MEB sur monocristaux Fe α	111
- IV.1. Orientations de glissement sur plan (110), traction et compression,	112
- IV.2. Orientations de glissement sur plan (112) sens facile, traction et compression	128
- IV.3. Orientations de glissement sur plan (112) sens difficile, traction et compression ...	137
- IV.4. Modélisation du comportement et comparaison aux essais	148
- IV.5. Discussion des résultats	187
- IV.6. Références du chapitre IV	195
Le chapitre V : L'analyse topologique de données AFM du glissement dans Fe α	197
- V.1. Analyse qualitative en glissement sur plans (110) et (112) sens facile et difficile ...	197
- V.2. Cas du glissement sur plans (110) résumé français et texte anglais de l'article à paraître dans Acta Materialia.....	206
- V.3. Références du chapitre V (références de l'article)	228
Le chapitre VI : L'étude en DD du rôle des carbures sur la cission critique	231
- VI.1. Principe des simulations DD	232
- VI.2. Interaction d'une dislocation avec le précipité isolé et la rangée périodique	235
- VI.3. Interaction avec les précipités aléatoirement distribués de taille unique	238
- VI.4. Interaction avec les précipités aléatoirement distribués bi-disperses	239
- VI.5. Estimation de la contribution à la cission critique pour les essais menés	242
- VI.6. Références chapitre VI.....	243
La conclusion générale	245

CHAPITRE I – RAPPELS GENERAUX EN PLASTICITE CRISTALLINE

Ce chapitre de rappels est construit comme une entrée progressive dans la problématique du sujet traité, en posant à mesure les jalons de ce qui sera réellement utile au long de la lecture des travaux rapportés. Nous commençons par introduire les quelques outils de représentation cristalline qui seront rencontrés tout au long du travail.

I.1. Projection stéréographique, figure de pôle, figure de pôle inverse

I.1.a. La projection stéréographique.

En géométrie et en cartographie, la **projection stéréographique** est une méthode permettant de représenter une sphère (privée d'un point, un pôle) sur un plan. Le plan de projection est le plus souvent le plan équatorial. Le pôle est le point cible de la projection : si on prend le pôle sud (S), tous les points Z de l'hémisphère nord se projettent en Z' à l'intérieur du plan équatorial au plan d'intersection avec la ligne joignant Z et S.

Tout cercle sur la sphère — hormis ceux passant par le pôle sud — sera transformé en un autre cercle dans le plan équatorial. Les angles sont conservés pendant la transformation. L'équateur reste lui-même durant cette transformation.

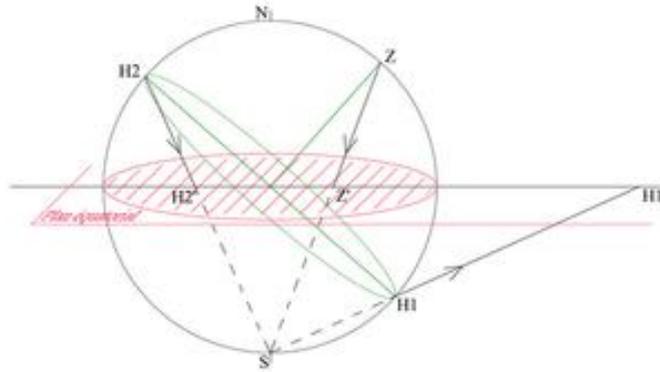


Figure I.1. : Projection stéréographique

I.1.b. La figure de pôles.

La **figure de pôles** est une manière de représenter les orientations dans l'espace. Les pôles d'un plan équatorial de la sphère sont les intersections de la normale au plan avec la surface de la sphère.

Considérons un cube d'orientation quelconque, dans une base orthonormale $(\vec{e}_1^0, \vec{e}_2^0, \vec{e}_3^0)$, le cube étant lui-même muni d'une base orthonormale $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$. On peut représenter l'orientation de ce cube par les rotations nécessaires pour passer d'une base à l'autre. Mais on peut aussi représenter son orientation par deux pôles, qui fixent deux faces du cube.

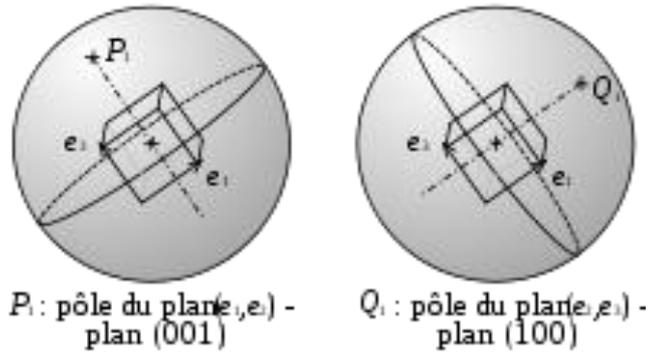


Figure I.2. : Principe de la figure de pôles.

La figure de pôles est en fait la projection stéréographique des pôles considérés. Pour représenter l'orientation du cube, soit on place les deux pôles sur la même figure, soit on utilise deux figures, une par pôle, pour des raisons de plus grande clarté le plus souvent. Pour faire de la géométrie dans une figure de pôles on utilise un abaque (de Wulff).

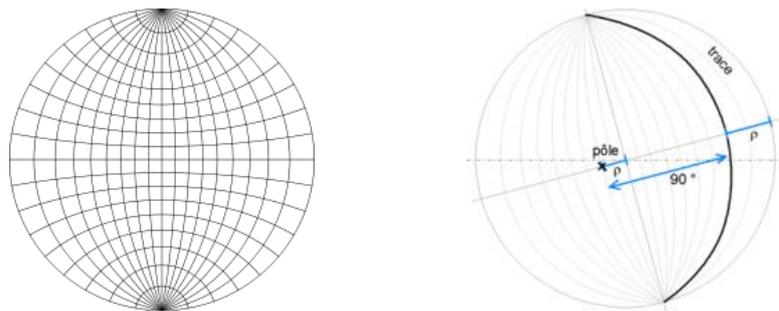


Figure I.3. : Abaque de Wulff (gauche) et mesure des angles (droite).

L'intersection d'un plan passant par le centre avec la sphère est un grand cercle. La projection stéréographique de ce grand cercle est appelée « trace du plan » ; c'est un arc. Lorsque des plans se recoupent en une même droite Δ , ils sont dits « en zone autour de l'axe Δ ».

L'**abaque de Wulff** est un calque sur lequel sont portées les traces de plans en zone autour d'un axe horizontal. L'angle entre deux plans consécutifs est toujours le même. Ainsi, si l'on a la trace d'un plan, pour connaître son inclinaison par rapport à l'horizontale, il faut faire tourner l'abaque autour de l'origine afin que la trace du plan corresponde au mieux à une des traces de l'abaque puis lire l'angle correspondant aux traces de l'abaque les plus proches de la trace en question.

On utilise fréquemment une figure de pôles pour représenter la structure d'un cristal. On choisit pour cela un plan qui sera l'équateur, donc dont le pôle sera le centre de la figure (par exemple le plan (001) ou bien le plan (011) pour une structure cubique), puis on place les pôles des autres plans. Les indices de Miller - (hkl) en structure cubique - sont indiqués pour chaque pôle (le cas des structures hexagonales, un peu plus compliqué, n'est pas abordé ici).

Dans la matière polycristalline, on peut représenter l'orientation de chaque cristal par les figures de pôles de deux plans. Sur une figure de pôle, chaque point correspond à une orientation possible du plan considéré. Si le domaine d'étude contient peu de cristaux on pourra placer un point pour chacun. Si par contre le domaine contient de nombreux cristaux on aura une fonction de distribution d'orientations, représentée par des courbes de niveaux.

Lorsque l'on fait la figure de diffraction d'un monocristal sur un plan perpendiculaire au faisceau incident (cliché de Laue), chaque tâche correspond à un plan (hkl) . La position de la tâche sur la figure de diffraction donne l'orientation du plan par rapport au faisceau incident.

Connaissant les paramètres de l'optique (et notamment la distance entre le cristal et le film photographique), il est possible de construire le diagramme stéréographique à partir des tâches de diffraction, c'est-à-dire de transformer le diagramme de diffraction en figure de pôles. On se sert là encore d'un abaque.

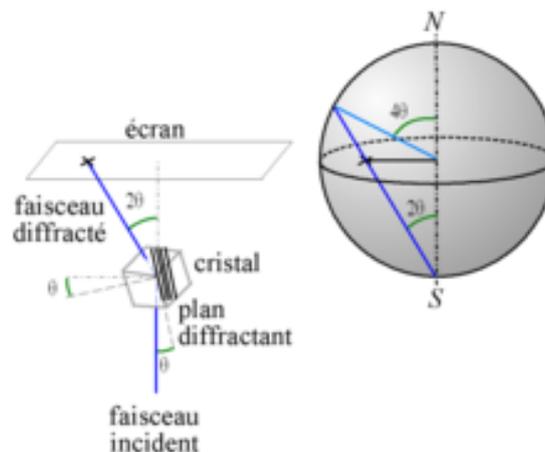


Figure I.4.: Principe du diagramme de diffraction X

I.1.c. La figure de pôle inverse.

Comme son nom l'indique, c'est une sorte d'inverse de la figure de pôle : au lieu de représenter une ou plusieurs orientations cristallographiques dans un même repère de référence (la figure de pôles), on repère un ensemble d'orientations caractérisant un repère de référence, le repère propre de divers échantillons ou des différentes éprouvettes par exemple, dans un même repère cristallographique. Cette représentation inverse est très utile pour notamment représenter ensemble différentes orientations d'essais ou d'observations.

Comme la figure de pôles, il faut deux informations (deux orientations) pour définir complètement un volume (un cube) de cristal. Comme la figure de pôles, les symétries cristallines rendent inutiles de représenter la figure entière. Selon les cas, une fraction suffit. Dans le cas des symétries cubiques, il y a 24 « triangles de référence » identiques, l'information contenue dans l'un quelconque étant la

même que dans les 23 autres. Il faudra donc deux triangles de références pour entièrement définir un volume de cristal par deux axes.

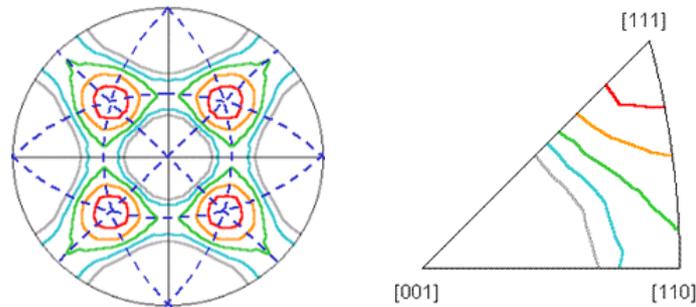


Figure 1.5. : Exemple de figure de pôles inverse, globale à gauche, un triangle de référence à droite

Dans les structures cubiques, toute direction $\langle hkl \rangle$ désigne également par sa normale, le plan (hkl) de mêmes indices.

I.2. La mobilité des dislocations.

Vues d'assez loin de leur position, les dislocations sont des défauts linéiques dont chaque segment est caractérisé par un vecteur tangent \vec{t} . Le défaut lui-même, c'est-à-dire la faute d'arrangement atomique, est caractérisé par un vecteur, le vecteur de Burgers \vec{b} . On appelle plan de glissement du segment le plan défini par \vec{t} et \vec{b} . Un plan de glissement théorique \vec{t} et \vec{b} n'est pas nécessairement un plan de glissement possible. Seuls les plans denses permettent le glissement de dislocations pour des contraintes accessibles. Ces « lignes » de dislocations, dont le caractère d'un segment à un autre varie de vis (vecteur de Burgers porté par le segment) à coin (vecteur de Burgers perpendiculaire au segment dans le plan de glissement), ne peuvent que glisser dans leur plan de glissement, si c'est un plan possible, à moins d'être purement vis. Les dislocations vis ont, seules, le privilège de ne pas être assujetties à un plan de glissement unique. Pour se déplacer hors de leur plan de glissement (mécanisme de montée), les dislocations doivent créer ou consommer des lacunes. On dit que ce mouvement est non conservatif.

Les dislocations peuvent avoir (idéalement parlant) une forme de boucle fermée sur elle-même, être une forme polygonale planaire ou non planaire dont les segments ne sont pas nécessairement rectilignes, ou encore être interconnectées dans un réseau tridimensionnel de segments plus ou moins courbés. Elles assemblent donc des segments vis, des segments coins et des segments mixtes non nécessairement tous de même plan de glissement.

Propriété capitale, si elle n'est pas fermée sur elle-même ou connectée dans un réseau, une ligne de dislocation ne peut que s'achever en surface libre et en aucun cas à l'intérieur du cristal (sauf sur un autre type de défaut, un précipité par exemple).

La courbure des segments indique la présence de contraintes sur ces segments : une contrainte, appliquée sur le cristal de l'extérieur ou une contrainte interne courbe celle-ci dans une position d'équilibre avec la tension que toute ligne de dislocation porte et la friction que certains réseaux opposent. L'absence de courbure n'indique pas nécessairement l'absence de contrainte car certains segments ne peuvent glisser.

I.2.a. Contraintes sur les dislocations.

La mobilité des dislocations provient de leurs mécanismes de déplacement sous les contraintes (de toutes natures) subies. Un segment se courbe entre deux points de fixations et la courbure augmente avec la contrainte jusqu'à ce que la dislocation, si les points de fixation sont solides, s'enroule et se referme en boucle qui se libèrera de l'ancrage selon le processus de **source de Franck-Read** qui est le principe de base de mise en mouvement des dislocations et de leur multiplication. Si une fixation cède, le segment avancera jusqu'à un autre ancrage, etc. D'autres types de sources existent, mais nous n'entrerons dans cette zoologie ici.

Dans son mouvement, la dislocation doit avancer dans le réseau cristallin qui lui oppose une force de friction périodique (**force de Peierls**) plus ou moins importante selon le réseau et selon le type de plan (hkl). Elle est notamment plus forte dans la structure CC que dans la structure CFC et aux basses températures qu'à température élevée. Elle est thermiquement activée et donc disparaît dans le régime athermique, au-dessus d'une certaine température (environ $0,3$ ou $0,4T_f$, avec T_f la température de fusion). Cette force provient de l'énergie potentielle de la dislocation qui est une fonction périodique de sa position, alternant « vallées » et « collines ». Les directions atomiques denses sont les vallées de Peierls ce qui explique que les segments de dislocation préfèrent être selon les directions denses. Une dislocation n'a la forme d'une boucle que lorsque la friction de réseau dans son plan de glissement ne privilégie pas de vallées. Pour des raisons énergétiques, les dislocations portent des décrochements, simples ou multiples. Pour la structure CC cette caractéristique est capitale. Les dislocations ne s'y déplacent jamais globalement d'une vallée à la suivante, elles procèdent par avancées fractionnées, la migration des décrochements. L'énergie nécessaire est apportée par le bilan des contraintes internes et externes ainsi que par l'agitation thermique. Tous les mécanismes impliqués diffèrent donc dans leur détail selon la structure, la température et le bilan des forces en présence.

Dans ce bilan des forces participant au mouvement des dislocations, entrent également les contraintes induites par les autres défauts présents, les autres dislocations bien sur mais aussi toutes les impuretés présentes.

La force exercée par un segment de dislocation sur un autre segment s'exprime **selon la formule de Peach-Koehler** :

$$\vec{F} = \boldsymbol{\sigma} \vec{b} \wedge \vec{t}$$

Cette force est une composante capitale du bilan des forces sur un segment de dislocation et donc dans la formulation de sa mise en mouvement

Les impuretés exercent une contrainte plus compliquée, étudiée par **Orowan**, dont la loi a fait ensuite l'objet d'améliorations successives. L'étude de la contrainte due aux impuretés, précipités et lacunes a fait l'objet dans ce travail de simulations numériques menées en dynamique des dislocations (code MicroMegas). **L'étude réalisée est reportée au chapitre VI.**

Le principe des simulations par DD, qui sera précisé dans le chapitre concerné, est de mettre en mouvement dans une maille élémentaire représentative un ensemble réaliste de segments de dislocations sous le bilan des contraintes précédemment citées et de déterminer les contraintes qui permettent de réaliser un glissement imposé au travers de populations diverses d'obstacles.

La mobilité par glissement des dislocations non vis n'étant possible que dans leur plan de glissement et dans la direction de leur vecteur de Burgers (le mécanisme de montée hors plan n'est pas considéré ici), la composante de la contrainte agissant selon ce plan et cette direction, la cission résolue ou réduite, est censée a priori participer au mouvement de manière prépondérante, sinon exclusive. Mais si la structure CFC satisfait raisonnablement à cette prépondérance, la structure CC montre parfois des comportants plus complexes, auxquels ce travail s'est intéressé. Nous y reviendrons.

Vue de plus près de sa position, une autre caractéristique essentielle, de nature atomistique, est que les dislocations ont une **structure de cœur**, terme qui désigne la zone dans laquelle la singularité que chacune constitue perturbe fortement son réseau cristallin alentour. S'il a été possible de développer une théorie élastique des dislocations, celle-ci ne s'applique pas dans les cœurs de dislocations. Cette perturbation s'étend de manière variable sur quelques positions atomiques selon l'énergie de faute d'empilement du métal. L'arrangement spatial de cette perturbation qui peut aller de quasi plan à volumique, est un élément fondamental dans la compréhension de la mobilité élémentaire des dislocations.

I.2.b. Dislocations dans les structures CFC et CC.

Pour les métaux CFC, les dislocations étant selon des directions $\langle 110 \rangle$ (axes de symétrie d'ordre deux) et dans des plans (111), la structure de cœur est généralement confinée dans ces plans. Il y a néanmoins une dimension volumique puisque selon qu'il s'agit d'un plan atomique en plus ou en moins (faute intrinsèque ou extrinsèque), la zone est comprimée ou distendue dans le sens perpendiculaire au plan de faute. La faute d'empilement est encadrée de dislocations partielles de vecteurs de Burgers selon les directions coplanaires $\langle 112 \rangle$. Le mouvement du ruban de faute se fera toujours dans le plan (111) de glissement. La contrainte normale au plan n'a pas d'influence significative macroscopiquement (hormis peut-être dans les régimes de très hautes pressions). Les dislocations coins sont en général plus mobiles que les dislocations vis. Pour changer de plan (dévier), une dislocation vis fautée, c'est-à-dire porteuse d'un ruban de faute, doit réaliser un processus de recombinaison-redissociation.

Au cours de leurs déplacements, de nombreuses interactions entre dislocations fautées ont lieu. Celles-ci opèrent en combinant de telles séquences. L'énergie de faute d'empilement varie fort d'un métal à un autre.

Pour les métaux CC, les dislocations étant selon des axes de symétrie ternaire $\langle 111 \rangle$, la structure de cœur est généralement non planaire et plus complexe. De nombreux schémas de dissociations en partielles ont été proposés, par différentes techniques de calculs DM ou ab initio, faisant différentes hypothèses sur les potentiels interatomiques et impliquant diversement des plans (110) et/ou (112), qui sont (dans l'ordre indiqué) les plus denses plans de zone $\langle 111 \rangle$. De nombreuses propositions faites impliquent des fautes d'empilement qui sont soit théoriquement hypothétiques, soit énergétiquement défavorables. Le détail du mouvement à l'échelle atomique fait toujours aujourd'hui l'objet de controverses, que les travaux les plus récents en DM alimentent sans trancher définitivement.

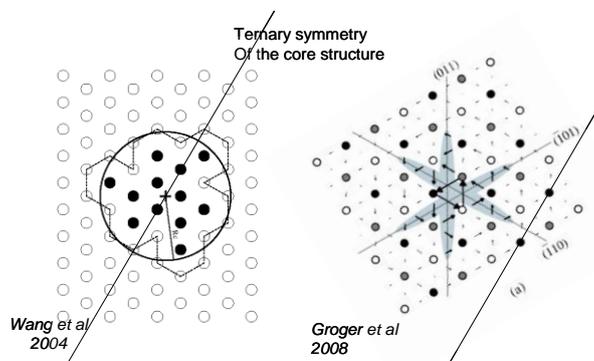


Figure I.6. : Exemples de représentations du cœur de dislocations dans les cristaux CC.

Un consensus semble néanmoins s'être fait sur quelques points fondamentaux:

- si les dislocations sont en boucles les segments vis sont très longs et « généralement » essentiels. Les segments coins jouent néanmoins parfois un rôle important qui compliquent beaucoup la lecture des observations ;
- la structure de cœur est compacte (c'est à dire sans fautes s'étendant sur des distances supérieures à quelques distances interatomiques) plutôt symétrique soit de symétrie ternaire, soit hexaédrique, autour de la ligne de dislocation (**WAN 2004, GRO 2008**). Sous l'effet d'une contrainte appliquée, la symétrie, quelle qu'elle soit, est rompue ;
- le mouvement d'une ligne vis se fait en plusieurs étapes sur la base de doubles décrochements successifs, amenant la dislocation d'une position favorable (vallée) à une autre voisine, en passant par une position défavorable ;

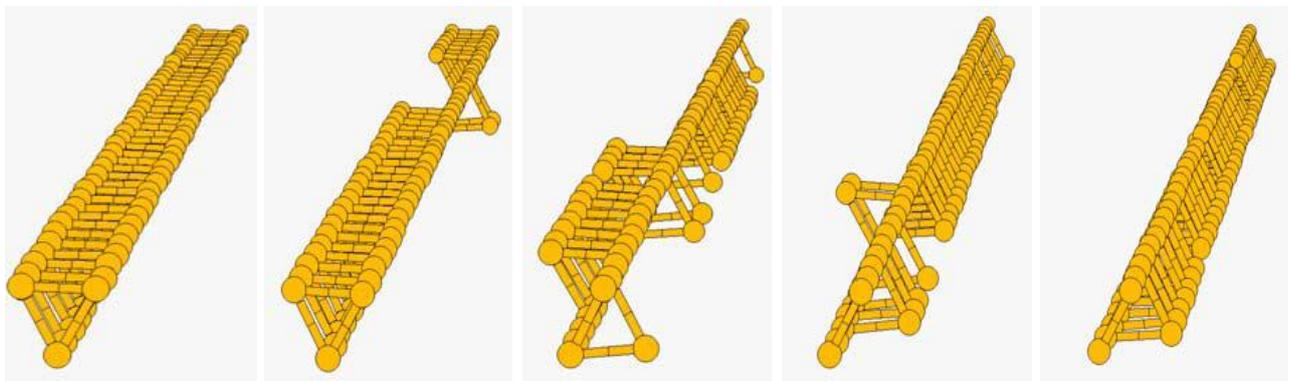


Figure 1.7. : *Mouvement type d'une dislocation vis dans un plan (110) CC (DOM 2005)*

D'emblée, ces informations privilégient les plans de zone (110) et (112), les triplets de plans (110) ou (112) exprimant chacun la symétrie ternaire principale alors qu'ensemble ils traduisent la symétrie hexaédrique. Il importe de souligner dès maintenant que la plupart des plans atomiques (hkl) autres que (110) qui sont en zone d'une direction $\langle 111 \rangle$ ne sont pas symétriques selon que l'on déplace dans un sens ou dans l'autre le demi espace supérieur par rapport au demi espace inférieur, perpendiculairement à la direction $\langle 111 \rangle$. Cette asymétrie rend le mouvement des dislocations dans ces plans plus difficile dans un sens que dans l'autre. On parle de sens facile « F » ou de sens difficile « D » pour le glissement dans un plan non symétrique vis-à-vis du sens du glissement, également notés « T » ou « AT » par emprunt au maillage (twinning), asymétrique en général, et même unidirectionnel parfois (un seul sens possible).

Une autre conséquence de cette asymétrie de structure est une inversion attendue de comportement lorsque le sens d'une contrainte appliquée est inversé puisque les systèmes sont sollicités en sens inversés.

Quelle que soit la complexité sous jacente, à cette échelle atomique, les deux familles de plans (110) et (112) jouent donc un rôle quasiment établi dans les déplacements « unitaires » (pas à pas ou de site atomique en site atomique) des dislocations dans les cristaux CC. Il semble même admis qu'aucun autre plan que ceux-ci ne participe, hormis des situations très exceptionnelles (liées à la présence de certains types d'impuretés par exemple).

La mobilité simultanée d'un grand nombre de dislocations appartenant à différents plans et de vecteurs de Burgers variés au moins en orientation engendre des interactions et, lorsque le bilan énergétique est favorable, des produits d'interaction. Ce sont soit des types crans – des décrochements hors plan de glissement – ou encore des boucles autour des obstacles rencontrés, soit des jonctions, qui sont de nouveaux segments de dislocations. Leur position est à la jonction des deux plans interagissant, d'où leur nom, et leur vecteur de Burgers peut être autre que dans une direction dense. Leur plan de glissement théorique peut ne pas être activable, les jonctions sont alors dites « sessiles » (non mobiles). Ces jonctions pourront ou non glisser, elles-mêmes pourront interagir avec les dislocations pour former des jonctions de second ordre etc (**FRA 1982, MAD 2008, BUL 2006**). Tous ces nouveaux objets participent peu à la déformation plastique (peu de glissement associé) mais participent beaucoup à la multiplication des défauts et en conséquence à l'écroutissage comme nous le verrons. Certaines rencontres conduiront au contraire à l'annihilation des dislocations interagissant. Ces disparitions de défauts sont à l'origine de la restauration et de la saturation de l'écroutissage.

I.3. Mécanismes et systèmes de glissement des métaux CFC et CC.

La notion de « glissement », par rapport à la notion de mobilité des dislocations du paragraphe précédent, doit se comprendre comme la poursuite sur une distance « grande » (par rapport à la dimension de cœur ou par rapport aux déplacements élémentaires), du mouvement des dislocations sur leur plan de glissement et dans la direction du vecteur de Burgers. On sous-entend donc a priori du « glissement plan » pour chaque famille de dislocations, dans un plan défini par des vecteurs \vec{l} et \vec{b} . S'agissant de dislocations vis, la question du ou des plans de glissement est moins évidente à répondre que pour des dislocations coins, mais pour ces dernières la question de planéité se pose plus fort. La surface de glissement de dislocations peut ne pas être plane non seulement pour des dislocations vis mais aussi pour des dislocations coins ou mixtes. Pour l'observateur, le glissement se manifeste par des traces en surface d'éprouvette. Ces traces sont orientées selon l'intersection du plan (ou de la surface) de glissement et de la face d'éprouvette observée, elles suivent donc la normale commune aux normales à ces deux surfaces ou plans. La sinuosité des traces observées est un indicateur de non planéité du glissement qui est fortement bruité à la fois par l'imparfaite planéité

(rugosité) des surfaces d'éprouvettes et par un front de glissement par plan qui est loin d'être rectiligne.

I.3.a. Les systèmes de glissement des métaux CFC.

Les dislocations coins portent l'essentiel du glissement. Dans un large domaine de température et de vitesses de déformation, les métaux CFC (Al, Cu, Ni, Au,) glissent sur de longues distances dans les plans denses de type (111) et selon les directions denses de type $\langle 110 \rangle$.

Les divers moyens d'observation l'établissent nettement par l'apparition de traces de glissement très rectilignes. Pour les dislocations vis, la présence de glissement dévié clairement identifié lorsqu'il est possible ne contredit pas ce constat général, les traces rectilignes ne montrant que des déviations localisées et non des sinuosités étendues. L'angle entre les deux plans de même direction de glissement (colinéaires) est de $70^\circ,53$. L'angle en surface entre les traces est moindre mais restent en général assez élevé pour bien distinguer leur éventuelle présence conjointe. Pour les hautes températures d'autres plans sont observés comme les plans (100) rapporté dans le livre de B. Jaoul (**JAO 1965**) mais la direction de glissement reste la direction de type $\langle 110 \rangle$. Le fait que les dislocations parfaites, de vecteur de Burgers $\langle 110 \rangle$ ont une forte tendance à se diviser en partielles de type $\langle 112 \rangle$ ne modifie pas cet état de fait, du moins tant que la dissociation ne s'accompagne pas d'une trop grande largeur de faute d'empilement (la distance entre les partielles). Lorsque l'énergie de faute d'empilement est faible (argent ou certains laitons par exemple), les partielles peuvent en effet devenir quasiment indépendantes l'une de l'autre. On n'observe pas pour autant de glissement macroscopique dans les directions $\langle 112 \rangle$. C'est plutôt le mécanisme de maillage qui opère selon ces directions.

Le glissement sur plans (111) dans les cristaux CFC est clairement considéré comme plan. C'est le « card glide » de la terminologie anglo-saxonne des années 50.

Il y a dans les cristaux CFC 4 plans de type (111) et 6 directions de type $\langle 110 \rangle$, chaque plan contenant 3 directions et chaque direction appartenant à 2 plans, l'ensemble se visualisant par les faces et les arêtes du **tétraèdre de Thomson**. On les nomme systèmes octaédriques.

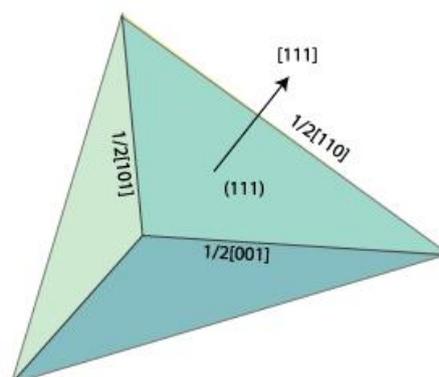


Figure I.8. : Tétraèdre de Thomson

Cet ensemble de 4 plans et 6 directions dont chacune porte deux sens possibles de glissement conduit à un ensemble de 2x12 systèmes de glissement équivalents. Cet ensemble se superpose à la symétrie cubique fondamentale qui définit 24 portions d'espace équivalentes. Cette partition d'espace peut-être arbitraire, mais on verra par la suite qu'en choisissant les 24 « triangles » (au moins un des côtés est courbe sur une projection stereographique) qui ont pour sommets un triplet d'orientations $\langle 001 \rangle - \langle 111 \rangle - \langle 011 \rangle$ (respectivement communs à 8, 6 et 4 triangles équivalents) on peut associer chacun d'eux à l'activation préférentielle d'un des 24 systèmes de glissement octaédriques en sollicitation uniaxiale. Chacun des 3 côtés d'un triangle de référence est commun avec un triangle voisin donc constitué des orientations de glissement double symétrique.

Les couples plan-direction $(111) - \langle 110 \rangle$ définissent donc deux fois 12 systèmes de glissement octaédriques qui sont listés dans le **tableau I.1** selon la notation de Schmid et Boas. Les plans sont désignés par les lettres A, B, C, D et les directions par les chiffres de 1 à 6. Ce nombre est dédoublé soit en considérant les 6 directions de glissement opposé, soit de manière équivalente les 4 plans de normale opposée.

Indice	b	Plan	Indice	b	Plan
A2	[0-11]	(-111)	C1	[011]	(-1-11)
A3	[101]	(-111)	C3	[101]	(-1-11)
A6	[110]	(-111)	C5	[-110]	(-1-11)
B2	[0-11]	(111)	D1	[011]	(1-11)
B4	[-101]	(111)	D4	[-101]	(1-11)
B5	[-110]	(111)	D6	[110]	(1-11)

Tableau I.1. : Les systèmes de glissement dans la structure CFC

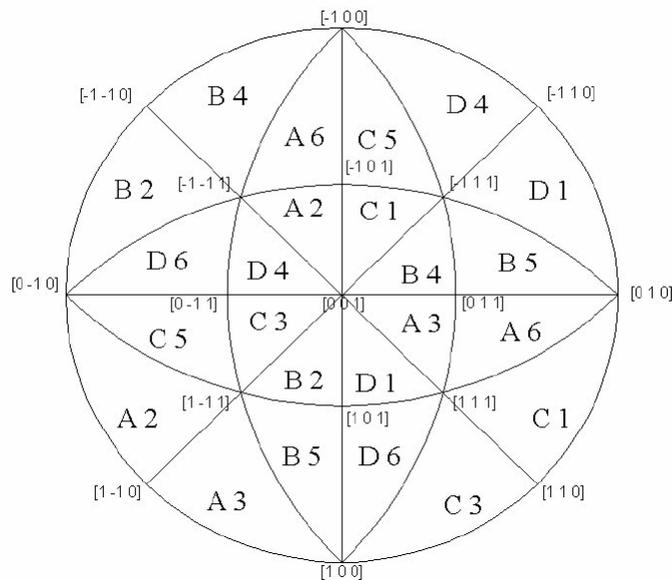


Figure 1.9. : Les triangles de référence équivalents des systèmes octaédriques, CFC ou CC.

Ces systèmes sont équivalents cristallographiquement, ce qui ne signifie pas qu'ils se comportent identiquement en toutes circonstances.

Sur l'illustration rapportée des triangles de référence CFC en forme de projection stereographique d'axe $\langle 001 \rangle$, figurent en pointilles deux exemples de traces de plans de monocristal qui traversent toute la projection avec sur ces deux traces, divers points qui figurent autant de directions de choix possibles de direction cristallographiques dans ce plan, chacune se trouvant dans un triangle de référence différents (les 2 traces passent dans le triangle B4) et dans des positions variables à l'intérieur de ces triangles.

On voit sur cette représentation qu'en alternative à l'utilisation de 2 figures de pôles (directes ou inverses) pour désigner entièrement un échantillon cristallin par son axe principal et la normale à sa face principale, on peut, sans perdre en clarté utiliser l'axe principal et le plan principal lui-même sur une même figure. On peut aussi ajouter la visualisation de la normale aux plans tracés en exemples.

De manière plus compacte, que nous utiliserons parfois dans la suite, l'information de la trace du plan peut être rassemblée dans un unique triangle de référence, celui qui contient l'axe principal. En revanche, rapporter la normale de grande face dans ce même triangle comme illustré n'a pas d'utilité : les informations essentielles comme les angles entre cette normale et les directions de glissement ou les normales aux plans de glissement ne sont respectées que sur la projection stéréographique entière précédente.

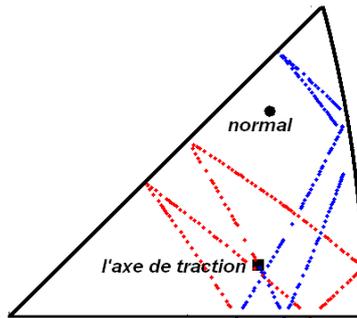


Figure I.10: Deux exemples (rouge, bleu) de trace du plan de surface d'éprouvette ramenée au triangle de référence.

Selon une terminologie dorénavant bien installée, les systèmes partageant le même plan sont dits coplanaires, ceux de même direction sont dits colinéaires. Deux systèmes coplanaires correspondent à 2 triangles de référence ayant en commun un côté de type $\langle 011 \rangle - \langle 111 \rangle$. On parle de « systèmes critiques » si les directions de glissement sont perpendiculaires, ce qui est le cas des systèmes dont les triangles de référence partagent un côté de type $\langle 001 \rangle - \langle 011 \rangle$. Enfin, pour les systèmes dont les triangles de référence partagent un coté de type $\langle 001 \rangle - \langle 111 \rangle$ on parle de « systèmes conjugués ». Ils ont la particularité d'avoir des dislocations qui interagissent favorablement en constituant de nouvelles dislocations (jonctions) sur des plans (100) et qui donc ne sont pas censés glisser (sauf dans des régimes de haute température). Cet ensemble de cas épuise presque toutes les positions géométriques possibles de deux systèmes, hormis un cas (le plus fréquent) qui ne porte pas de nom répertorié, représenté par les paires (B4-A2) ou (B4-D1) par exemple. Leur particularité est que leurs dislocations peuvent interagir pour en former une nouvelle (une jonction) sur un 3eme système coplanaire à l'un des 2 de la paire (B5 et D6 respectivement pour les 2 exemples). Le **tableau I.2** récapitule ces types purement géométriques, dont on verra par la suite qu'ils jouent un rôle dans la description de l'érouissage et à travers elle dans la loi de comportement.

En ayant posé les caractéristiques principales du glissement dans les métaux CFC, on a souligné qu'étaient posés aussi les fondamentaux régissant l'écoulement plastique et l'érouissage dont le critère et la loi sont évoqués ci-après. On va voir que pour les raisons similaires, ou plutôt contraires, la description difficile du glissement dans les métaux de structure CC rend plus difficile la caractérisation du critère d'écoulement et celle de l'érouissage.

	A2	A3	A6	B2	B4	B5	C1	C3	C5	D1	D4	D6
A2	a0	a1	a1	a2	a5	a5	a6	a5	a4	a6	a4	a5
A3	a1	a0	a1	a5	a6	a4	a5	a2	a5	a4	a6	a5
A6	a1	a1	a0	a5	a4	a6	a4	a5	a6	a5	a5	a2
B2				a0	a1	a1	a6	a4	a5	a6	a5	a4
B4				a1	a0	a1	a4	a6	a5	a5	a2	a5
B5				a1	a1	a0	a5	a5	a2	a4	a5	a6
C1							a0	a1	a1	a2	a5	a5
C3							a1	a0	a1	a5	a6	a4
C5							a1	a1	a0	a5	a4	a6
D1										a0	a1	a1
D4										a1	a0	a1
D6										a1	a1	a0

a0	a1	a2	a4	a5	a6
Dipolaire	Coplanaire	Colineaire	J. Lomer	J. Glissile	J. Hirth

Tableau I.2 : Matrice des paires d'interaction géométriques entre systèmes octaédriques

I.3.b. Les mécanismes de glissement des métaux CC.

Nous parlerons d'abord de mécanismes avant de parler de systèmes au sens utilisé dans le paragraphe précédent pour la structure CFC.

Les travaux de Taylor et Elam dès 1923 (**TAY 1923**, **TAY 1925**, **TAY 1926**) posaient la polémique difficilement refermée concernant le mécanisme de plasticité fondamentale des cristaux CC : y a-t-il des plans cristallographiquement définis de glissement ou bien n'est-il possible que de fixer des directions de glissement, les directions denses $\langle 111 \rangle$, autour desquelles tous les plans en zone contribueraient identiquement ? Dans un papier historique, Taylor et Elam expliquaient avec une poignée de crayons hexagonaux, que les traces de glissement souvent sinueuses observées lors de la déformation des cristaux CC d'orientation générale étaient le résultat d'un glissement non cristallographique appelé « pencil glide », par opposition au « card glide » utilisé pour le glissement plan typique des cristaux CFC. Ce pencil-glide attribuait aux dislocations vis un déplacement sinueux selon une direction moyenne préférentielle liée aux contraintes s'exerçant sur le cristal. La variation d'amplitude des sinuosités était expliquée provenir des variations d'inclinaison de la direction du vecteur de burgers par rapport à la normale à la surface observée.

Ce déplacement moyen étant nécessairement constitué de pas élémentaires, la nature cristallographique de ceux-ci a fait l'objet d'amples discussions qui durent encore aujourd'hui.

La section hexagonale des crayons utilisés par (TAY 1923, TAY 1925, TAY 1926) dans leur explication, outre qu'il s'agissait d'une forme (commerciallement disponible) permettant de remplir l'espace, traduisait les fondements géométriques de la structure atomique autour d'une direction ternaire $\langle 111 \rangle$. Cette section pouvant résulter du choix de 3 plans (110) ou de 3 plans (112), la préférence allant aux plans denses (110). L'ensemble des plans (110) et (112) en zone d'une direction $\langle 111 \rangle$ partitionne l'espace en secteurs de 30° et l'écart correspondant entre des traces de plans en zone sur une surface d'éprouvette est toujours inférieur à cette valeur.

Pour une dislocation vis dont le vecteur de Burgers est normal à la surface observée, la sinuosité traduite par le modèle pencil glide est maximale, constituée d'une succession de marches inclinées de 60° (**figure I.11**). Si au contraire le vecteur de Burgers est parallèle à la surface, la sinuosité n'apparaît pas, les traces sont droites. Du moins elles seraient droites si un tel glissement débouchait en surface, ce qui est difficilement le cas, car ce que l'on observe en surface ce sont des marches directement liées à la direction du glissement.

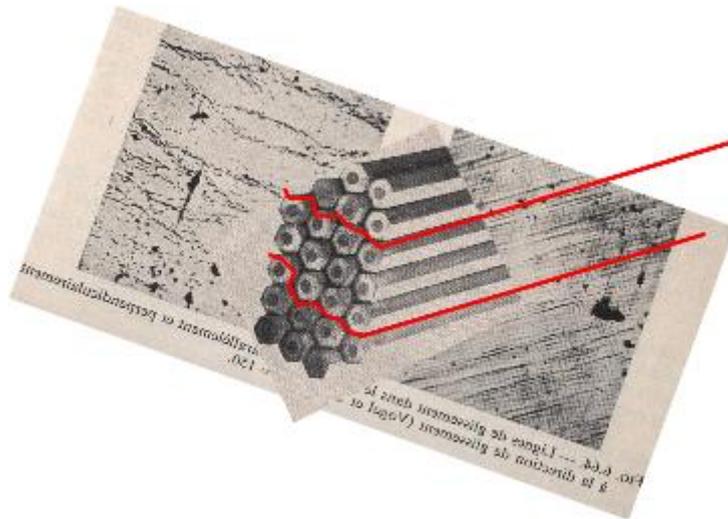


Figure I.11 : Pencil glide (d'après JAO 1965)

On désigne par **coefficient de visibilité** d'un système de glissement, le cosinus de l'angle que fait le vecteur de Burgers avec la normale à la surface observée, de sorte que sa valeur soit 1 quand l'angle est nul et qu'elle soit zéro quand le vecteur de Burgers est dans le plan observé.

Plus le coefficient de visibilité d'un système est faible moins ce système est observable en surface (un groupe de systèmes colinéaires aura le même coefficient de visibilité). L'interprétation pencil glide a très tôt trouvé des contradicteurs (SEE 2001) car cette analyse ne répondait pas à toutes les interrogations suscitées par les observations. Et les tenants d'un glissement nécessairement cristallographique aux échelles élémentaires ont trouvé aujourd'hui un fort soutien des simulations

de DM. Et il ne reste guère de place pour du glissement cristallographique autre que sur les plans (110) et les plans (112), hors situations d'exception déjà évoquées.

En revanche, de nombreuses situations expérimentales rapportèrent tôt l'observation de glissement sur plans denses (110) uniquement. Et pour un métal donné, selon le domaine de température, le glissement sera tantôt uniquement de type (110) tantôt plus mélangé entre (110) et (112). Mais le statut de ce dernier est toujours controversé. Beaucoup de travaux le rapportant le voient encore comme une trace moyenne s'expliquant par du glissement colinéaire (110). Généralement le glissement (110) s'observe d'autant plus seul que la température est basse. Dans ces situations, le glissement apparaît donc planaire dans la limite de la résolution des moyens utilisés, indépendamment de la structure de cœur non planaire des dislocations. Les systèmes $\langle 111 \rangle (110)$ sont toujours qualifiés d'octaédriques bien que inversés par rapport à la structure CFC.

Le scénario du mouvement de la dislocation pour un tel glissement plan reste à préciser, même si les simulations de DM ont de ce point de vue apporté des éclairages déterminants. Elles montrent que les mécanismes de décrochements multiples évoqués précédemment sont très présents dans la mobilité des dislocations d'une maille CC. A l'échelle des déplacements individuels, il est bien difficile de dire si des portions de déplacement empruntent ou non des plans (112) en association à des plans (110) ou à leur place. Ces analyses DM locales on rendu en tout cas très improbables l'implication d'autres plans que ces deux familles là.

Macroscopiquement, si le glissement implique seulement les plans (110), l'ensemble des 6 plans (110) et des 4 directions $\langle 111 \rangle$ définit 24 systèmes de glissement comme pour la structure CFC, à l'inversion plans/directions près. Dans ce cas, les figures de pôle directe et inverses, entières ou partielles, présentées pour la structure CFC restent valides pour la structure CC. La même symétrie conduit à la même partition en 24 triangles équivalents, chacun pouvant être pris en référence. On les désigne par la même notation associant une lettre A,B,C,D avec un chiffre de 1 à 6, le chiffre étant placé en premier (ex le triangle noté B4 pour la structure CFC sera noté 4B pour la structure CC).

Chaque direction $\langle 111 \rangle$ correspond à 3 systèmes (110) $\langle 111 \rangle$ colinéaires et chaque plan (110) correspond à 2 systèmes coplanaires. Le nombre de paires de systèmes géométriquement différentes est le même que pour la structure CFC, et le **tableau I.2** reste donc valide. On peut constater qu'il n'y a que deux possibilités autres que colinéaires pour une paire de vecteurs de burgers $\langle 111 \rangle$: soit ils font un angle de environ 71° ($\arccos(1/3)$) soit ils font l'angle obtus supplémentaire. La recombinaison n'est favorable énergétiquement que pour l'angle obtus puisque on a (l'énergie d'un segment unitaire étant proportionnelle au carré du vecteur de Burgers):

$$\langle 1,1,1 \rangle + \langle 1,-1,-1 \rangle = \langle 2,0,0 \rangle \text{ avec } \|1,1,1\| + \|1,-1,-1\| = 6 \text{ et } \|2,0,0\| = 4 \quad (\text{I.1.a})$$

$$\langle 1,1,1 \rangle + \langle -1,1,1 \rangle = \langle 0,2,2 \rangle \text{ avec } \|1,1,1\| + \|-1,1,1\| = 6 \text{ et } \|0,2,2\| = 8 \quad (\text{I.1.b})$$

Si les systèmes de glissement étaient les systèmes de type $\langle 111 \rangle (112)$ seuls, le nombre de systèmes serait également 24. A supposer que ces systèmes soient symétriques vis-à-vis du glissement, ce qui n'est pas le cas du point de vue géométrique, les triangles de référence $\langle 001 \rangle - \langle 111 \rangle - \langle 011 \rangle$ resteraient équivalents mais ne correspondraient plus à un seul système prépondérant, mais à 2, chacun prépondérant dans un sous-domaine. Le cas symétrique de cette partition nouvelle est illustré **figure I.12**. Les nouveaux sommets $\langle 11k \rangle$ sur les zones $\langle 001 \rangle - \langle 111 \rangle$ correspondent aux directions $\langle 2,2,(\sqrt{17}+1) \rangle$ à $28,9^\circ$ de $\langle 001 \rangle$. Sur les zones $\langle 001 \rangle - \langle 011 \rangle$ ce sont les directions $\langle 012 \rangle$:

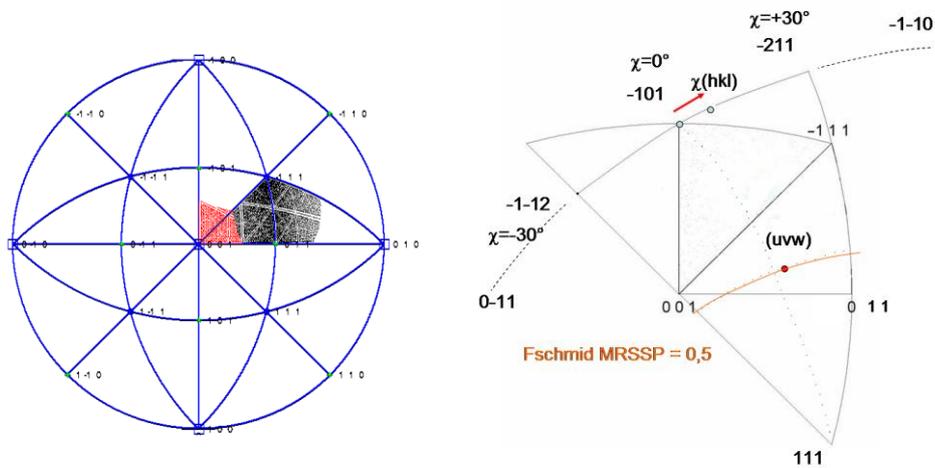


Figure I.12: Les sous-domaines d'activation des systèmes (112) dans le triangle de référence (gauche) et la position des normales aux plans (112) correspondants (droite)

Si ces systèmes sont directionnels, c'est-à-dire activables que dans un seul sens, le sens facile, le nombre de systèmes serait moitié moindre que le nombre de triangles de références.

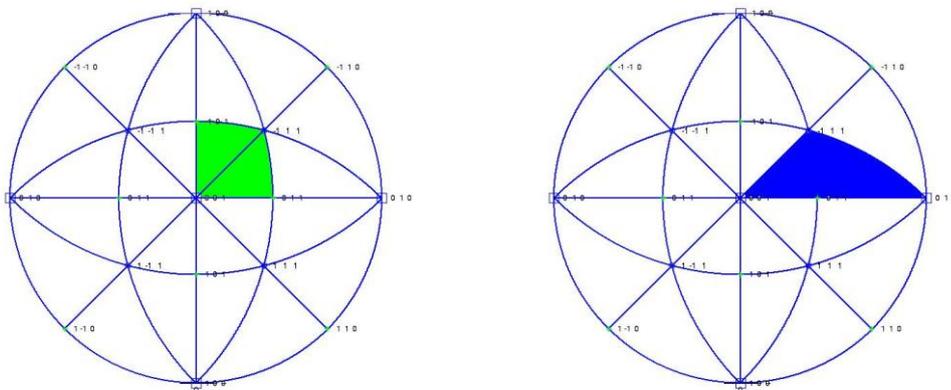


Figure I.13: Zones d'activité du glissement (112) en sens facile uniquement, en traction (gauche) et compression (droite)

Une notation dérivée de la notation de Schmid et Boas pour les systèmes $(112)\langle 111 \rangle$, introduite par (FRA 1984), reprise dans le travail de Madec et Kubin (MAD 2004), est rapportée **Tableau I.3**.

Pour chaque direction il y a 3 systèmes $(112)\langle 111 \rangle$ colinéaires. Mais il n'y a pas de systèmes $(112)\langle 111 \rangle$ coplanaires.

Si on considère ensemble les plans (110) et les plans (112) , ces derniers n'étant a priori ni symétriques ni directionnels, chaque triangle de référence portera une sous partition en 3 domaines.

En termes de paires géométriques de systèmes, une nouvelle matrice 12×12 vient s'ajouter pour représenter les paires de systèmes mixtes. Au total, la matrice complète est montrée le **Tableau I.4**.

Dans cette grande matrice, le nombre total de possibilités géométriques distinctes est de 17 (MAD 2004), sans encore considérer d'asymétrie particulières des systèmes de plans (112) .

Notation	Plane	b	Notation	Plan	b
2A	(0-11)	[-111]	6'A	(1-12)T	[-111]
3A	(101)	[-111]	2''A	(211)AT	[-111]
6A	(110)	[-111]	3'A	(12-1)T	[-111]
2B	(0-11)	[111]	4''B	(1-21)AT	[111]
5B	(-110)	[111]	2'B	(2-1-1)T	[111]
4B	(-101)	[111]	5''B	(11-2)AT	[111]
1C	(011)	[-1-11]	3''C	(-121)AT	[-1-11]
5C	(-110)	[-1-11]	5'C	(112)T	[-1-11]
3C	(101)	[-1-11]	1''C	(2-11)AT	[-1-11]
1D	(011)	[1-11]	6'D	(-112)T	[1-11]
4D	(-101)	[1-11]	1''D	(21-1)AT	[1-11]
6D	(110)	[1-11]	4'D	(-1-2-1)T	[1-11]

Tableau I.3: Les systèmes de glissement de plans (110) et (112)

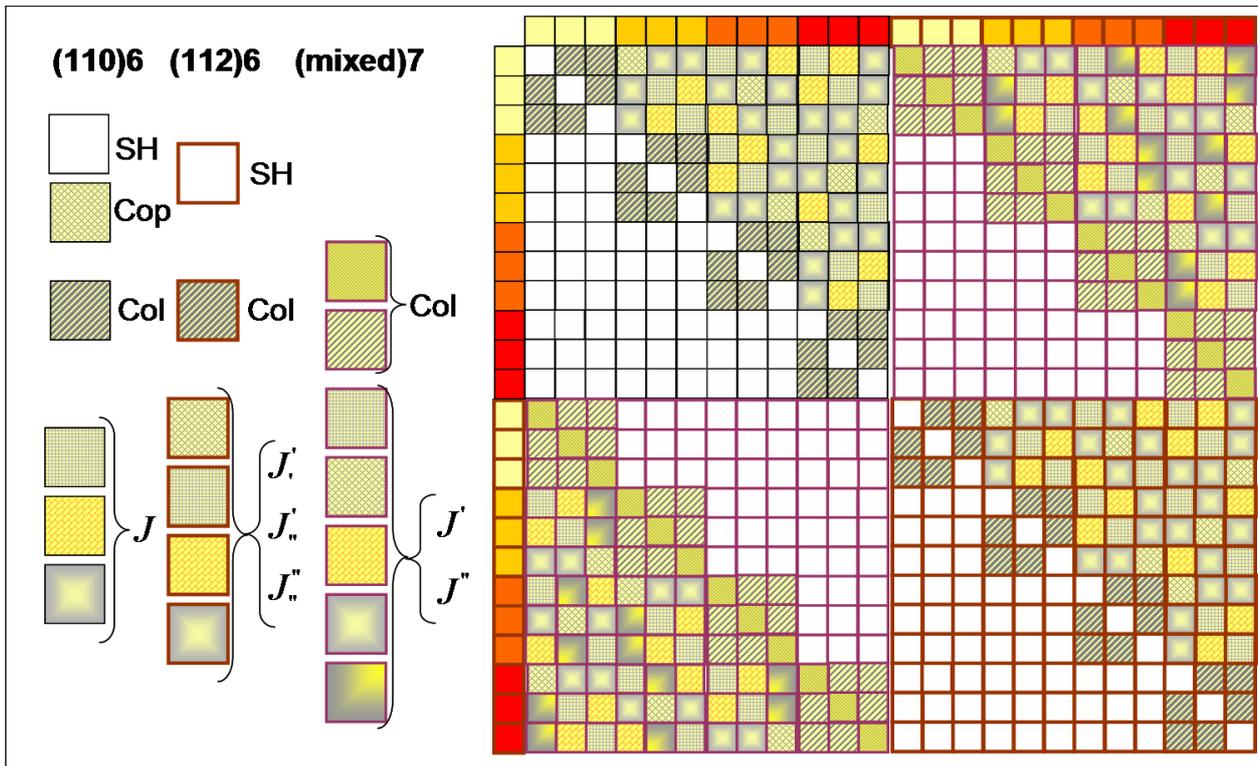


Tableau I.4: La matrice géométrique d'interaction entre plans (110) et (112)

Pour terminer, l'hypothèse d'un glissement possible de manière équivalente selon tout plan en zone d'une direction $\langle 111 \rangle$ conduirait à ne distinguer sur la figure de pôle que les 4 portions équivalentes du cercle équatoriale, constituées des 6 triangles de référence autour de chaque direction $\langle 111 \rangle$.

Pour chacune des directions $\langle 111 \rangle$ on trouve en zone une alternance de plans (110) et de plans (112), avec la particularité que chaque plan (110) est encadré d'un côté par un plan (112) orienté facile « F » et de l'autre par un plan (112) orienté difficile « D ». Ceci n'est pas une caractéristique anodine, notamment si l'orientation difficile devenait strictement impossible. Une asymétrie fondamentale s'exprimerait sur cette simple visualisation. Et en alternance en tournant autour d'une direction $\langle 111 \rangle$, d'un plan (110) au suivant, la paire 112F et 112D sera droite/gauche puis gauche/droite. Avec une telle quantité de plans potentiels de glissement en zone d'une même direction, à 30° seulement les uns des autres, toute trace sinueuse peut s'expliquer par l'activité simultanée d'une paire mixte de plans dans une pondération régie par les contraintes appliquées.

Mais au-delà de la simple géométrie, la partition de la figure de pôle la mieux appropriée à la situation des glissements identifiés doit aussi tenir compte du critère de plasticité s'appliquant, ce qui devient une manière de le visualiser et d'en obtenir de nombreuses informations liées à la géométrie.

I.4. La loi de Schmid et les critères principaux de plasticité cristalline.

I.4.a. Critère de Schmid et critère de Schmid généralisé.

Sur la base d'une grande quantité d'essais mécaniques sur des monocristaux de métaux purs, en commençant par un hexagonal se déformant par glissement basal, puis sur métaux CFC (Cu, Al, etc), Schmid (1934) a établi que l'activation d'un système de glissement dans un cristal recuit se produisait lorsque la cission résolue sur ce système était la plus élevée et donc la première à atteindre une valeur de cission critique, caractéristique des systèmes du métal. Cette « loi de Schmid », corroborée par toutes les études ultérieures, du moins sur les métaux CFC et HC en glissement basal, est toujours aujourd'hui sous sa forme généralisée (à tout stade de l'écoulement) parmi les critères les plus utilisés de plasticité cristalline.

La loi de Schmid originelle établit que pour une sollicitation uniaxiale de contrainte σ selon une direction $\langle hkl \rangle$, c'est lorsque la plus grande des cissions résolues $\max(\tau_g)$ sur tous les systèmes (g) atteint une valeur τ_0 que la déformation plastique s'initie par le glissement du système le plus sollicité ainsi, qu'on nomme système primaire « p ».

Pour un système p dont les angles ($\langle 111 \rangle, \langle hkl \rangle$) et ($\langle 110 \rangle, \langle hkl \rangle$) sont notés (θ, λ) la cission résolue est définie par :

$$\tau_p = \sigma \cos \theta \cos \lambda = \sigma R_p$$

On appelle R_p le facteur de Schmid du système p. Le système initialement actif p est le système de plus grand facteur de Schmid initial. La valeur maximum d'un facteur de Schmid est 0,5, lorsque la direction de glissement, l'axe de sollicitation et la normale au plan de glissement sont dans un même plan et dans cet ordre, séparés de 45° . Compte tenu des symétries cristallines, que ce soit pour les directions $\langle 110 \rangle$ de la structure CFC ou les directions $\langle 111 \rangle$ de la structure CC, tout axe de sollicitation dans un triangle de référence ne peut être à moins de $35,26^\circ$ de la direction de glissement relative à ce triangle, ce qui correspond à un coefficient de visibilité maximum de $0,816^1$.

La forme complète de la loi de Schmid nécessite d'ajouter à la condition d'activation potentielle $\tau_p = \tau_0 = \tau_{cp}$ la condition d'activation effective, que le système primaire soit encore actif un instant après, donc que les vitesses satisfassent aussi à $\dot{\tau}_p = \dot{\tau}_{cp}$, le seuil étant susceptible de s'élever du fait d'écrouissage probable.

¹ Pour une sollicitation respectivement d'axe $\langle 111 \rangle$ et d'axe $\langle 110 \rangle$.

Cette forme complétée constitue la forme généralisée du critère de Schmid que l'on peut écrire, à tout instant de l'écoulement et pour tout tenseur de contrainte σ_{ij} (de Cauchy) dans un repère de chargement x_1, x_2, x_3 :

$$\max\left(\frac{\tau^g}{\tau^c g}\right) = 1 ; \quad \tau^g = \mathbf{R}_{ij}^g \sigma_{ij}$$

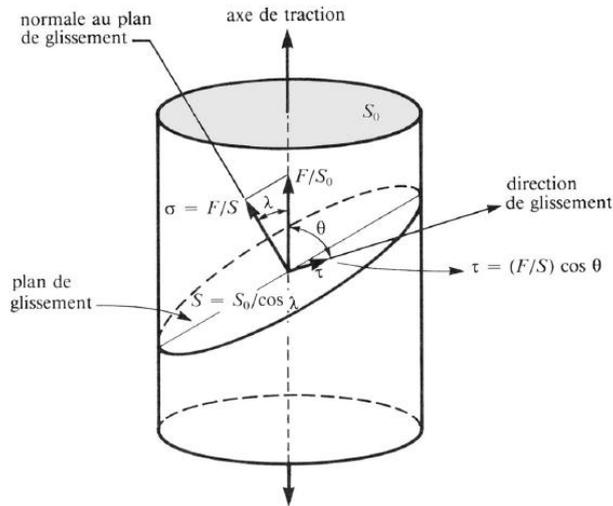


Figure I.14 : Illustration de la géométrie du glissement plan

Cette généralisation repose sur l'introduction du tenseur de Schmid $\mathbf{R}_{ij}^g = \{m_i^g n_j^g\}$ où les accolades représentent la partie symétrique du produit dyadique $\mathbf{m}^g \otimes \mathbf{n}^g$, avec $\mathbf{m}^g, \mathbf{n}^g$ les vecteurs unitaires de respectivement la direction de glissement et la normale au plan de glissement du système g, dans le repère de chargement.

Pour certaines orientations de symétrie, plusieurs systèmes peuvent satisfaire simultanément ce critère. C'est notamment le cas en sollicitation uniaxiale d'axe $\langle 001 \rangle$ ou $\langle 111 \rangle$ ou $\langle 011 \rangle$ sur les sommets d'un triangle de référence, ou même sur les cotés le long desquels 2 systèmes ont le même facteur de Schmid.

Tant qu'une seule déformation plastique est imposée, axiale par exemple, un seul système activé suffit. Toute situation à plusieurs systèmes dans ce cas simple crée une indétermination.

Le nombre maximum de composantes indépendantes du tenseur de déformation plastique $\boldsymbol{\epsilon}^p$ étant 5 (pour cause d'incompressibilité plastique $trace(\boldsymbol{\epsilon}^p) = 0$) et la relation de la déformation plastique aux glissement s'écrivant, en vitesses, $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p = \sum_g \mathbf{R}^g \dot{\gamma}^g$ ou incrémentalement $d\boldsymbol{\epsilon}^p = \sum_g \mathbf{R}^g d\gamma^g$, toute

situation impliquant plus de 5 systèmes crée également une indétermination, ce qui est le cas d'une sollicitation axiale $\langle 111 \rangle$ (6 systèmes) ou $\langle 001 \rangle$ (8 systèmes).

Le problème de l'indétermination a été abordé spécifiquement (WIN 1980, FRA 1991, CAI 2005, PET 2005). Une solution favorable parmi plusieurs possibles peut être sélectionnée par une procédure de minimisation énergétique par exemple.

I.4.b. Critère de Schmid régularisé par viscoplasticité.

Une alternative pas tout à fait équivalente a été substituée (PEI 1982), qui consiste à supposer que sur chaque système de la structure il y a une vitesse de glissement non nulle dès lors que les cissions résolues sont non nulles. On écrit la vitesse de glissement sur chaque système sous la forme (dépendante du temps que 't' représente ici):

$$\dot{\gamma}^s(t) = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^s(t)}{\tau_c^s(t)} \right)^{1/m} \quad (\text{I.2})$$

Dans cette formulation, la vitesse $\dot{\gamma}_0$ est une référence conventionnelle, l'exposant $1/m$ est grand devant 1 (m petit), les cissions critiques sont définies comme dans le critère de Schmid généralisé par l'évolution de l'érouissage. Mais à la différence avec ce dernier, la cission résolue n'atteint jamais exactement cette valeur critique qui lui reste toujours supérieure bien que proche (on parle d'équipotentielles comme autant de surfaces homothétiques et internes à la surface de charge). Ainsi exprimé, il s'agit d'un critère sans seuil plastique initial (le glissement s'initie dès la mise en charge). Des variantes avec seuil (CAI 2005) ont été par la suite introduites, notamment pour les sollicitations non monotones où l'érouissage cinématique est important, cas non repris ici).

Dans cette régularisation, tous les systèmes sont toujours (plus ou moins) actifs tant qu'ils subissent une cission résolue non nulle, sans régime élastique (problématique lorsqu'il convient de prendre en compte les contraintes résiduelles après décharge) et en situation de sollicitation symétrique, tous les systèmes équisollicités interviennent également dans la mesure où ils ont la même cission critique. Lorsque m est grand devant 1, les contributions des systèmes dont la cission résolue n'est pas très près de leur cission critique ont une contribution négligeable au glissement.

Le calcul des incréments de glissement $d\gamma^s(t) = \gamma^s(t+dt) - \gamma^s(t)$, donc la résolution pas à pas des conditions d'écoulement, se fait par méthode d'interpolation entre t et t+dt:

$$d\gamma^s(t) = (1-\theta)\dot{\gamma}^s(t)dt + \theta\dot{\gamma}^s(t+dt)dt \quad \text{avec } \theta \text{ entre } 0 \text{ et } 1,$$

$$\dot{\gamma}^s(t+dt) = \dot{\gamma}^s(t) + \frac{\partial \dot{\gamma}^s(t)}{\partial \tau^s(t)} d\tau^s(t) + \frac{\partial \dot{\gamma}^s(t)}{\partial \tau_c^s(t)} d\tau_c^s(t)$$

avec les dérivées partielles $\frac{\partial \dot{\gamma}^g(t)}{\partial \tau^g(t)} = \frac{\dot{\gamma}^g(t)}{m\tau^g(t)}$ et $\frac{\partial \dot{\gamma}^g(t)}{\partial \tau_c^g(t)} = -\frac{\dot{\gamma}^g(t)}{m\tau_c^g(t)}$,

soit à résoudre le système

$$d\gamma^g(t) = \dot{\gamma}^g(t) \left(1 + \frac{\theta}{m} \left(\frac{d\tau^g(t)}{\tau^g(t)} - \frac{d\tau_c^g(t)}{\tau_c^g(t)} \right) \right) dt = \dot{\gamma}^g(t) \left(1 + \frac{\theta}{m} \left(\frac{d(R_{ij}^g \sigma_{ij})}{\tau^g(t)} - \frac{\sum_{k=1}^N h^{gk}(t) d\gamma^k}{\tau_c^g(t)} \right) \right) dt \quad (\text{I.3})$$

En contraintes toutes imposées par exemple (et rotations totales nulles pour simplifier, telles que $\omega_{ij}^e = -\omega_{ij}^p$ et en posant $d(R_{ij}^g) = \sum_{k=1}^m a_{ij}^{gk} d\gamma^k$), on obtient la forme :

$$\sum_{k=1}^N \left(\delta^{gk} + \frac{\theta}{m} \left(\frac{h^{gk}(t)}{\tau_c^g(t)} + \frac{a_{ij}^{gk} \sigma_{ij}}{\tau^g(t)} \right) \dot{\gamma}^g(t) dt \right) d\gamma^k = \left(1 + \frac{\theta}{m} \frac{R_{ij}^g d\sigma_{ij}}{\tau^g(t)} \right) \dot{\gamma}^g(t) dt.$$

Si m tend vers 0 (dans ce dernier exemple) pour les (n) systèmes à glissement non nul qui sont seulement ceux où $\tau^g(t) = \tau_c^g(t)$, on retrouve la solution du critère de Schmid généralisé :

$$\sum_{k=1}^n (h^{gk}(t) + a_{ij}^{gk} \sigma_{ij}) d\gamma^k = \sum_{k=1}^n H_{\sigma}^{gk}(t) d\gamma^k = R_{ij}^g d\sigma_{ij} \quad (\text{I.4})$$

et il en va de même pour tout autre chargement « mixte régulier » (précisé en **section I.7**).

I.4.c. Critère de Schmid régularisé en élastoplasticité.

Une autre régularisation a été proposée plus récemment (**ARM 1991, GAM 1991**) qui se distingue essentiellement de la précédente par le fait important qu'elle préserve l'existence d'un régime élastique et les notions associées.

Le potentiel plastique multiple de la loi de Schmid y est remplacé par un potentiel plastique unique, ce qui lui confère aussi l'avantage d'être implémentable dans les codes de calcul en élastoplasticité formatés pour accueillir un tel potentiel, ce qui est le cas de la plupart. On écrit à tout instant, avec N le nombre de systèmes de glissement non nécessairement équivalents :

$$F = \left(\sum_N \left(\frac{\tau_g}{\tau_{cg}} \right)^n \right)^{1/n} - 1 = 0 \quad (\text{I.5})$$

La limite élastique est définie par $\left(\sum_N \left(\frac{R_{ij}^g \sigma_{ij}}{\tau_0^g} \right)^n \right)^{1/n} = 1$, ce qui donne en sollicitation uniaxiale

$\sigma_0 = \left(\sum_N \left(\frac{R^g}{\tau_0^g} \right)^n \right)^{-1/n}$. La condition d'écoulement associée à $F = 0$ est $\dot{F} = 0$. On vérifie que les

incréments de glissement sont de la forme $d\gamma^g = d\lambda \left(\frac{\tau^g}{\tau_{cg}} \right)^{n-1} \frac{1}{\tau_{cg}}$ où $d\lambda$ est le multiplicateur plastique usuel, défini par $d\mathbf{E}^p = (\mathbf{F}, \boldsymbol{\Sigma})d\lambda$.

Pour les deux formes régularisées, lorsque n tend vers l'infini, on tend vers la loi de Schmid classique mais dans le cas où tous les systèmes activables seraient déclarés actifs en toutes circonstances et dans des contributions relatives prédéfinies par l'état de chargement et les cissions critiques instantanées (donc l'état d'écrouissage).

Le maintien en activité de l'ensemble des systèmes entretient de surcroît une redondance dans la mesure où tous les systèmes ne sont pas indépendants. Les exemples les plus immédiats sont la dépendance de systèmes coplanaires comme de systèmes colinéaires au-dessus de 2 systèmes, mais ce ne sont pas les seuls.

Le problème de l'indétermination de la loi de Schmid ne peut pas toujours être évacué par ce type de régularisation, notamment si des questions d'instabilité ou de bifurcation sont abordées.

Une littérature abondante fait état d'écarts plus ou moins importants à cette loi, moins pour les métaux CFC que pour d'autres structures. Mais il importe de bien distinguer écarts et violations. Par ailleurs des lois de Schmid diversement modifiées ont été proposées lorsqu'elle apparaissait insuffisamment bien rendre compte de certaines observations.

I.4.d. Ecarts à la loi de Schmid, structures cubiques.

Si la loi de Schmid est largement vérifiée pour les métaux CFC, des écarts à la loi ont été relevés pour des sollicitations uniaxiales près de la frontière du triangle de référence, là où plusieurs systèmes sont sollicités de manière quasi égale. En générale, la cission critique apparaît plus élevée pour ces orientations, ce qui peut provenir en partie d'une détection plus difficile (plus grande imprécision) du seuil plastique puisque la consolidation qui suit est en général de pente bien plus forte qu'en glissement simple (on peut passer de $\mu/10000$ à $\mu/250$, soit un facteur 40 environ, μ étant le module de cisaillement de référence). Les résultats de DD ont néanmoins montré que le nombre de systèmes également sollicités, sans qu'ils deviennent tous macroscopiquement actifs, intervient explicitement dans la loi d'écrouissage du monocristal, comme nous le verrons plus loin.

Pour la structure CC, un grand nombre de mentions d'écart ou de non respect provient d'une interprétation restrictive de la loi originelle : des systèmes de glissement de différents types (non équivalents cristallographiquement) ne respectent pas nécessairement la loi de Schmid au sens stricte si les différents types de systèmes ont des cissions critiques différentes. Mais la loi reste plutôt bien vérifiée si on admet qu'à différents types de systèmes puissent correspondre différents

seuils. En effet, le fait que les plans (112) n'aient pas le même seuil critique que les plans (110) ou bien que les plans (112) n'aient pas le même seuil dans le sens facile F ou le sens difficile D n'est pas incompatible avec une loi de Schmid étendue à la possibilité de seuils différents par types de systèmes ou sens de sollicitation. Et il semble plutôt normal que pour des systèmes asymétriques (cad qui n'auraient pas le même seuil dans un sens ou dans l'autre de glissement) des écarts à la loi de Schmid apparaissent sans pour autant constituer de violation.

En reprenant la figure de pôle purement géométrique de la section précédente, si tous les systèmes étaient activés dans les deux sens (sans asymétrie) pour une même cission critique atteinte par la cission résolue (la compréhension restrictive d'une loi de schmid s'appliquant) la partition des triangles de référence pour une sollicitation uniaxiale prendrait l'aspect de la **figure I.15**.

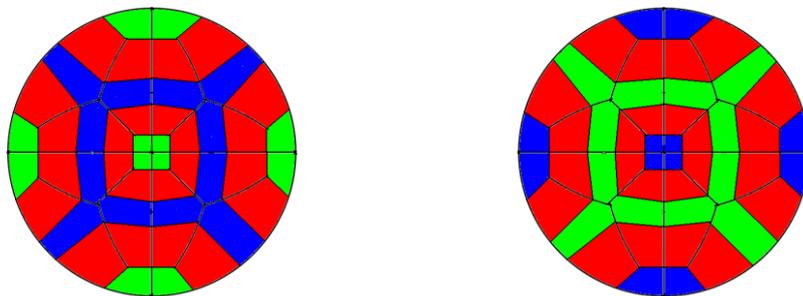


Figure I.15: Projections stereographiques pour les systèmes $(110)\langle 111 \rangle$ et $(112)\langle 111 \rangle$ de la structure CC, traction (gauche) et compression (droite) dans le cas d'égales cissions critiques pour tous. Le sens de glissement (112) facile est en vert, difficile en bleu

Si les systèmes $(112)\langle 111 \rangle$ ne sont activables que dans le sens facile, avec la même cission critique que les systèmes de plans (110), alors la figure de pole prend la forme de la **figure I.16** gauche en traction et de la **figure I.16** droite en compression.

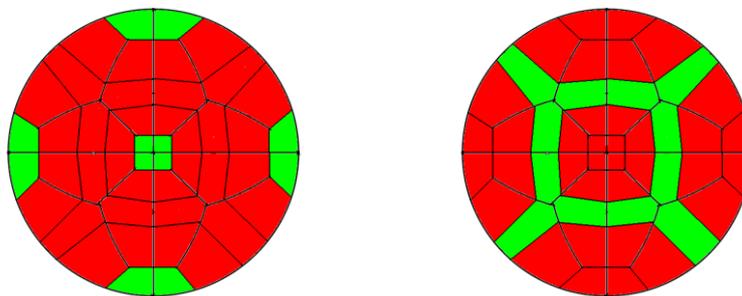


Figure I.16: Projections stereographiques pour les systèmes $(110)\langle 111 \rangle$ et $(112)\langle 111 \rangle$ de la structure CC, traction (gauche) et compression (droite) dans le cas d'un glissement (112) interdit en sens difficile. Le sens de glissement (112) facile est en vert.

Mais il est aisé de vérifier qu'il n'est pas nécessaire que le sens de glissement difficile (112) soit interdit pour qu'on ne l'observe pas : puisque les frontières entre les domaines $(112)F$ et (110) d'une

part et (112)D et (110) d'autre part ne sont pas fixes mais dépendent des rapports des cisssions critiques entre ces systèmes, un rapport des cisssions critiques entre le glissement sur un plan (112)D et celui sur un plan (110) supérieur à $2/\sqrt{3}$, soit 15,47%, rendra partout le glissement sur les plans (112)D impossible. Ce même écart, s'il s'appliquait aussi au sens facile de glissement sur les plans (112) rendrait les plans (110) prépondérant partout. On peut vérifier en balayant l'espace des contraintes et en comparant les cisssions résolues, que cette limite est la même, non seulement en sollicitation uniaxiale (traction comme compression) mais pour tout chargement. Autrement dit, il n'existe aucun mode de sollicitation permettant d'accroître cet écart de $2/\sqrt{3}$ entre cisssions critiques sur les 2 familles de plans, au-delà duquel le glissement sur plans (112) n'est pas permis. On pourrait de même établir d'autres limites similaires, mais pour des situations plus improbables puisque les plans les plus denses sont supposés avoir le seuil le plus bas, donc nous ne nous y arrêterons pas. Par définition, est aussi exclue l'option $\tau_0(112)D \geq \tau_0(112)F$.

Ces limites s'appliquent à tout instant de l'écoulement plastique durant lequel les valeurs relatives des cisssions critiques instantanées évoluent en permanence.

Il est important de noter que ces interdits ne s'appliquent plus avec cette radicalité dès lors qu'une régularisation est appliquée à la loi de Schmid : tous les systèmes ayant une contribution dans ce cas, des seuils relatifs pourront être différent au-delà des seuils ci-dessus sans interdire brutalement leurs contributions qui deviendront de plus en plus évanescences avec un écart augmentant.

I.4.e. « Violations » de la loi de Schmid.

En plus de ces écarts à la loi de Schmid dont la provenance est clairement identifiée et qui ne sont pas vraiment des violations (et nous montrerons au **chapitre III** qu'il y a encore d'autres sources d'écarts qui induisent de la variabilité sur les cisssions critiques des différents systèmes, y compris d'une même famille), la structure CC montre pour certains métaux et dans certaines circonstances un comportement de glissement nettement plus anormal, ou du moins plus complexe à interpréter, par rapport à la loi de Schmid.

Cette anomalie, qui n'est pas au cœur de notre propos et n'est pas mentionnée pour la ferrite, a été observée, dans certaines gammes de températures et de vitesses de déformation, dans le niobium dans les années 60, puis très étudiée ensuite dans le vanadium ou le molybdène de haute pureté, ainsi que le tantale, tous des métaux de forte anisotropie élastique comme de faible compressibilité. Elle a fait l'objet de multiples études et de scénarios récents très complexes et non toujours concordants: l'anomalie constatée pourrait davantage être dans ce cas une réelle violation de la loi de Schmid puisque pour des orientations de glissement simple sur un plan (110) à facteur de Schmid

dominant et de 0,5, c'est un glissement multi-planaire sur des plans (110) et systèmes de faibles facteurs de Schmid qui est observé.

On trouve néanmoins des scénarios qui restent compatibles avec la loi de Schmid et nous reviendrons aussi sur cette anomalie au **chapitre III**.

Les études de ces différentes déviations à la loi de Schmid par simulations DM ont fait apparaître le rôle souvent important de contraintes autres que la cission résolue sur le système de glissement dans le mouvement des dislocations, ces autres contraintes étant susceptibles de fournir une interprétation des comportements asymétriques en traction et compression et selon le sens des glissements sur les plans (112). Il en résulte un certain nombre de proposition de modification de la loi de Schmid pour prendre en compte les autres contraintes importantes.

I.4.f. Modifications de la loi de Schmid.

Des alternatives à la loi de Schmid, ou des « lois de Schmid améliorées » ont été examinées pour tenter de représenter les écarts précédemment mentionnés et notamment pour rendre compte de l'asymétrie de mouvement dans les plans (112), selon l'orientation de sollicitation et selon le signe de celle-ci.

Sans être exhaustif, les cas les plus « importants » sont mentionnés ci-après. Hormis l'hypothèse ancienne de pencil glide qui fait partie de l'ensemble, ils consistent à considérer que des composantes de contrainte autres que la cission résolue dans la direction de glissement et sur le plan de glissement participent à un critère d'écoulement plastique modifié en conséquence.

La modification la plus ancienne proposée est l'hypothèse de glissement sur le plan de cission résolue maximum (MRSS). La caractéristique en sollicitation uniaxiale étant que l'angle de l'axe avec la normale au plan de glissement est le complémentaire de l'angle avec la direction de glissement, la cission résolue s'écrit $\tau_{MRSS} = \sigma \sin \lambda \cos \lambda$. La modification qui suppose cette cission ayant une valeur critique n'apporte aucune interprétation d'asymétrie, elle ne fut pas introduite pour cela. La **figure I.17** montre en rouge les zones où la direction de glissement de grande cission résolue est la direction $\langle -111 \rangle$: dans le quart de surface autour de cette direction, cette zone d'activité est restreinte aux trois petits carrés près des axes $\langle 001 \rangle$. Dans le reste du domaine, ce sont les trois autres directions de glissement qui dominent.

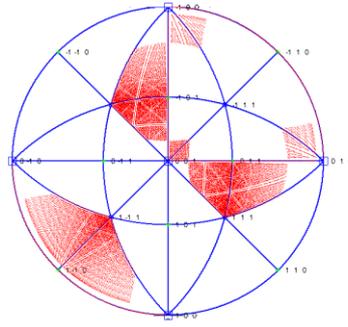


Figure I.17 : Zones de glissement préférentiel dans l'hypothèse de pencil glide. En rouge, le domaine d'orientations activant le glissement de direction $\langle 111 \rangle$.

Cette hypothèse a depuis été considérée comme n'améliorant pas les accords aux observations accumulées, en comparaison à la loi de Schmid.

- *Prise en compte de l'ensemble du tenseur des contraintes résolu sur chaque système de glissement.* Plusieurs travaux (**BAS 2001, VIT 2004**) ont examiné pour les cristaux CC un critère basé sur une somme pondérée de l'ensemble des termes du tenseur de contrainte résolu sur chaque système de glissement, considérant que la cisssion dans le plan de glissement et selon la direction de glissement n'agit pas seule en raison de la structure non planaire des dislocations. Pour l'essentiel, ce critère de « non glide stress effect » associe à la cisssion principale la contrainte normale au plan de glissement ainsi que la cisssion perpendiculaire à la direction de glissement. Cette somme pondérée doit alors équaler une contrainte seuil pour que le système soit activé.

S'agissant de la contrainte normale au plan de glissement, selon l'idée qu'une contrainte de tension aiderait le glissement alors qu'une contrainte de compression le contrarierait, cette possible contribution au critère de plasticité a été évoquée dans (**QIN 1992**). Cette contrainte normale $\sigma_n = n_i \sigma_{ij} n_j$, s'écrit en sollicitation uniaxiale $\sigma_n = \sigma \cos^2 \chi$ et l'on note que le signe de la contrainte appliquée impose le signe de toutes les contraintes normales sur tous les plans, seule l'amplitude changeant. Cette modification n'est donc pas de nature à expliquer une asymétrie traction/compression.

S'agissant de la cisssion résolue dans le plan de glissement et perpendiculaire à la direction de glissement (**DUE 1984, DUE 2002, ITO 2001**) celle-ci est dans une direction $\langle 112 \rangle$ et dans une direction $\langle 110 \rangle$ pour les plans (112). Cette prise en compte (avec le signe approprié) procure un effet d'asymétrie conforme à l'observation selon que l'axe de sollicitation est d'un côté ou de l'autre d'avoir un plan de cisaillement maximum de type (110), cas pour lequel la cisssion résolue sur le système perpendiculaire change de signe et donc le sollicite en sens facile d'un côté ou difficile de l'autre, avec une inversion F/D avec le signe de la contrainte appliquée. La justification de cette

modification réside dans l'analyse par DM de la mobilité des décrochements coins portés par les dislocations essentiellement vis. Cette cission perpendiculaire participe à la mobilité de ces décrochements et se voit donc impliquée dans la condition d'écoulement. La forme de la superposition retenue (combinaison linéaire pondérée avec la cission critique principale) reste toutefois à justifier.

-Prise en compte de la cission résolue sur les différents plans (110) de zone.

Cette possibilité est considérée dans l'hypothèse d'un glissement sur plans (110) uniquement (**VIT 2004**) et résulte également d'un constat provenant de calculs DM, où il semblerait que la cission sur un des deux plans (110) de zone voisins du plan de glissement joue un rôle dans le mouvement de la dislocation. La forme proposée introduit un coefficient d'ajustement dans une combinaison linéaire relativement arbitraire même si elle semble donner de bonnes comparaisons selon les auteurs. On notera que la dissymétrie des rôles dévolus aux deux plans (110) de part et d'autre du plan le plus sollicité s'apparente fort à une prise en compte d'un effet de dissymétrie de glissement (112) puisque les 3 plans (110) concernés sont séparés par 2 plans (112) l'un orienté en sens facile et l'autre en sens difficile.

Dans ces différents critères, les coefficients de pondérations servent de variables d'ajustement, certains étant semble-t-ils validés par les calculs de DM, mais il est difficile de comprendre les raisons qui les font différer d'un métal à un autre. D'autre part, la nature de la contrainte seuil qui doit être atteinte, par une somme de cissions dans diverses directions et de contraintes axiales demande à être précisée. Sa signification semble s'éloigner beaucoup du contexte d'écrouissage bien connu d'une forêt de dislocations devant être franchie par glissement.

Par rapport à la loi de Schmid et à ses régularisations, il semble donc que ces différentes modifications correspondent à des moyennes dont la justification reste à faire.

Nous verrons au chapitre III que le rôle important que prend le glissement colinéaire dans la structure CC permet, lorsqu'on le prend en compte en conformité avec les apports de la DD, de conserver au cadre de la loi de Schmid et de l'écrouissage forêt sa validité.

On peut également remarquer que le formalisme de loi de Schmid, la forme classique comme ses régularisations, peut être adapté de manière à prendre en compte certains couplages entre systèmes de glissement voire d'intégrer des contraintes supplémentaires aux seules cissions critiques sur les systèmes de glissement, sans pour autant constituer une violation de la loi. **Le chapitre III** en donne quelques exemples.

I.5. Caractéristiques géométriques du glissement cristallographique.

Lorsque le glissement s'effectue sur un plan et selon une direction bien définis, la description du mécanisme au niveau phénoménologique est géométrique. Il a fait l'objet d'une description maintes fois reproduite en sollicitation uniaxiale notamment, mais aussi en compression plane par exemple (HAV 1979, ORL 1990), et en torsion (CAN 1984). Les grandes lignes sont reproduites ci-après pour une sollicitation uniaxiale. Cette description s'appuie sur l'hypothèse d'un glissement homogène au sein de l'éprouvette chargée, dont l'analyse reportée au **chapitre V** (AFM) montrera combien elle est simplificatrice mais néanmoins raisonnable quand un seul plan est actif.

Si l'essai de traction ou de compression est tel qu'un système g de glissement et un seul est en situation d'être activé, ce glissement va se traduire par une variation des deux angles caractéristiques de son orientation par rapport à l'axe de sollicitation. Sur le schéma, le glissement γ est le rapport du déplacement de la section P en P' par la distance entre les plans des sections P et O.

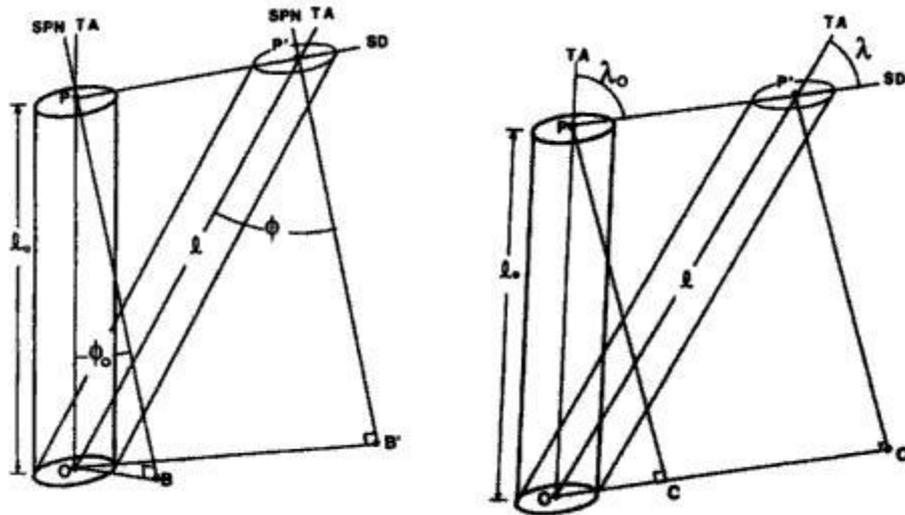


Figure I.18: Illustration d'un glissement simple homogène

Du fait que la rotation totale de l'axe de l'éprouvette peut être supposée nulle, l'allongement (ou la contraction) s'accompagne d'une rotation cristalline. On peut relier la variation des angles ϕ et λ à l'allongement (ou contraction) $l/l_0 = 1 + e = e^\varepsilon$ par les relations :

$$\frac{l_0}{\sin \lambda} = \frac{l}{\sin \lambda_0} \quad ; \quad l_0 \cos \phi_0 = l \cos \phi$$

où ϕ_0 est la valeur initiale de ϕ , λ_0 est la valeur initiale de λ et ε la déformation plastique axiale ε^p (la déformation élastique est négligée).

L'évolution de l'angle de l'axe avec la normale au plan de glissement ϕ est croissante en traction, décroissante en compression, celle de l'angle de l'axe avec la direction de glissement λ est décroissante en traction et croissante en compression, et elles sont données par :

$$\phi = \arccos\left(\frac{\cos \phi_0}{e^\varepsilon}\right) \quad ; \quad \lambda = \arcsin\left(\frac{\sin \lambda_0}{e^\varepsilon}\right)$$

Le glissement incrémental se met sous la forme $d\gamma = \frac{d\varepsilon}{\cos \phi \cos \lambda}$ où le produit $\cos \phi \cos \lambda$ est l'état

courant du facteur de Schmid R^g du système g , de valeur initiale précédemment rencontrée $\cos \phi_0 \cos \lambda_0$. La part de rotation dans le glissement est donnée par $\sin(\lambda - \lambda_0) = e \cdot \tan \lambda$.

Les situations de glissement multiple ne s'analysent pas aussi simplement sauf dans les situations où il reste homogène et où l'on peut fixer entre elles les valeurs relatives des différents glissements intervenant, puisque $d\varepsilon^p = \sum_g R^g d\gamma^g$. Il faut également distinguer le glissement multiple multi-

directionnel et multi-planaire, des cas de glissement coplanaire (mono-planaire) ou colinéaire (mono-directionnel).

Les cas de glissement colinéaire ou coplanaire s'analysent selon la même démarche que le glissement simple, les contributions incrémentales relatives des systèmes une fois déterminées, en se référant à l'incrément de glissement simple équivalent dg respectivement d'orientation unitaire m ou de plan de normale n défini par $\vec{m}dg = \sum_g \vec{m}^g d\gamma^g$ et $\vec{n}dg = \sum_g \vec{n}^g d\gamma^g$.

Le type de situation se prêtant le plus facilement à une analyse de type géométrique est le glissement multiple homogène symétrique et en particulier le glissement double : dans de nombreux cas, ce glissement multiple symétrique est stable les facteurs de schmid (égaux pour un groupe de systèmes équivalents ou dans des rapports fixés si des systèmes à cissions critiques différentes sont concernés) sont des constantes. L'analyse en l'absence de rotation est sans difficulté.

Ces cas peuvent inclure des situations de glissement double (pour une traction selon une direction $\langle 112 \rangle$ dans un crystal CFC par exemple).

Le cas du glissement double symétrique avec rotation a fait l'objet d'examen géométrique analogue au glissement simple mais pour des situations spécifiques. Il n'est pas le plus intéressant et nous ne le rapportons pas ici. Un glissement double dont le second glissement peut être exprimé en fraction du premier, s'analysera en posant $d\varepsilon^p = (R^p + \alpha R^s) d\gamma^p$.

On notera également que dans les formes régularisées du critère de plasticité, comme dans toute variante que l'on en ferait, l'analyse du glissement double ou multiple se réduit à une telle forme.

Par exemple la régularisation elastoplastique permet d'écrire $d\varepsilon^p = \left(\sum_g \mathbf{R}^g \left(\frac{\tau_g}{\tau_{cg}} \right)^{n-1} \frac{1}{\tau_{cg}} \right) d\lambda$.

Les situations les plus courantes indépendamment du glissement simple sont de type glissement non symétrique sur 2 plans non symétriques, non nécessairement de même type, une telle situation pouvant succéder à un premier stade de glissement simple donc se produire selon une grande variété de directions de sollicitation. En général, s'il y a eu un premier stade de déformation, les cissions critiques sur les systèmes ne seront plus égales même s'ils sont cristallographiquement équivalents, en raison de l'érouissage dont le chapitre suivant résume la loi.

Rappelons que pour un chargement uniaxial, lors d'un essai de traction qui active un système, la rotation totale du cristal rapproche l'axe de traction de la direction de glissement, ou d'une direction moyenne stable entre ces directions si le glissement met en jeu plusieurs systèmes de directions différentes. Une sollicitation de compression activant le(s) même(s) système(s) entraînera au contraire l'axe de compression à se rapprocher de la normale au plan de glissement ou d'une normale moyenne si plusieurs familles de plans participent à la déformation.

Pour une même sollicitation qui partirait d'une même orientation cristalline, on constaterait donc, à systèmes de glissement seulement de types octaédriques, une rotation de réseau allant en sens opposés si le cristal est de structure CFC ou CC.

Toutefois, les conditions aux limites en traction et en compression n'étant pas strictement identiques (ni strictement opposées) la différence de rotation n'est pas strictement l'inversion.

Les conditions aux limites usuelles de rotation pour les essais de traction uniaxiale et de compression uniaxiale sont définies en **section I.7.c**.

Certaines orientations de symétrie sont instables et conduisent à un glissement hétérogène durant lequel différents systèmes s'activent seuls dans des zones différentes du cristal. L'analyse quantitative de tels essais est rendue délicate à la fois parce que les sous-domaines d'activation de chaque glissement peuvent prendre des formes compliquées et imbriquées et parce que les interactions entre ces domaines sont difficiles à représenter. Il reste néanmoins possible d'identifier de manière instructive les systèmes actifs par les traces observés et les rotations suivies dans les différentes zones représentatives. Et fréquemment, l'un des systèmes finit par prendre le pas sur le ou les autres.

I.6. La loi d'érouissage des monocristaux déformés par glissement.

I.6.a. La matrice d'érouissage.

La loi d'érouissage et la matrice associée ont été définies dans le contexte de la loi de Schmid puisque seules les évolutions des cissions critiques dans le sens du glissement et selon la direction de glissement ont jusqu'à présent fait l'objet d'une modélisation.

L'érouissage associé à un glissement cristallographique est un processus incrémental qui au plan mécanique s'exprime sous la forme simple d'un développement au premier ordre en termes de glissements des cissions critiques instantanés sur les systèmes identifiés :

$$d\tau_c^g(\gamma^1, \gamma^2, \dots, \gamma^N) = \sum_{k=1}^N \frac{\partial \tau_c^g(\gamma^1, \gamma^2, \dots, \gamma^N)}{\partial \gamma^k} d\gamma^k = \sum_{k=1}^N h^{gk} d\gamma^k \quad (\text{I.6})$$

On prend par convention dans cette loi les systèmes dans leur sens de glissement positif.

Il s'agit de glissements moyens par système, les fluctuations de second ordre de moyenne nulle dont il a été montré qu'elles contribuaient à l'érouissage (**CAS 2006**) ne sont pas prises en compte. Cette « matrice d'érouissage » est constituée de $N \times N$ termes a priori non constants et non identiques, y compris pour la symétrie (g, k) .

Ce développement formel pourrait s'appliquer à d'autres seuils critiques et il en résulterait une autre matrice.

Pour des cissions critiques, l'expérience des métaux CFC a depuis fort longtemps établi que cette matrice varie en fonction de multiples paramètres et facteurs, aux premiers rangs desquels le type de sollicitation, l'amplitude de la déformation, le groupe de systèmes activés, le métal et sa composition, et qu'il n'est donc pas imaginable d'obtenir toujours une synthétisation réaliste de cette diversité.

Des hypothèses simples, recevables au cas par cas, ont néanmoins permis de progresser vers une formulation globale de la plasticité cristalline comme on le résume ensuite.

Ainsi, supposer une matrice constante peut satisfaire l'étude d'une petite amplitude de déformation tandis que supposer une matrice isotrope réduit la matrice à un seul paramètre scalaire dont on peut obtenir des estimations par confrontation expérimentale directe et ainsi vérifier si l'hypothèse de constance est légitime ou lui en substituer une meilleure.

Pour des déformations suffisamment importantes, l'érouissage sature et la plupart des modèles à un paramètre s'efforcent de traduire cette saturation (restauration) plus ou moins lente et brutale.

Par ailleurs, puisque seule une sous-matrice est pas à pas concernée par la loi de l'**eq. I.6** (constituée des colonnes associées aux systèmes actifs sur chaque incrément de déformation), le cas d'un glissement simple n'implique que d'avoir à considérer une colonne, mais entière puisque a priori l'érouissage doit impacter les cissions critiques de l'ensemble des N systèmes, actifs ou non.

La principale distinction qui est en générale introduite dans ce cas particulier est entre le système actif et tous les autres : l'écroissage est-il le même, moindre ou supérieur sur les systèmes inactifs que sur le système actif ?

Toutes les hypothèses ont été explorées, de l'absence à davantage d'écroissage des systèmes inactifs que sur le système actif, une grande majorité de données disponibles orientant la préférence sur l'option seconde de plus d'écroissage sur les inactifs que sur les actifs. L'hypothèse contraire se réfute par l'absurde en montrant qu'un écroissage restreint aux systèmes actifs entraînerait alors l'entrée en activité successive de beaucoup d'autres systèmes dans une permutation ininterrompue vers l'inactif le plus avantageux, fait contraire à toute observation.

L'échelle appropriée et pertinente pour appréhender l'écroissage est la même que celle nécessaire à la description de la déformation plastique, celle des dislocations.

I.6.b. La matrice des coefficients d'interactions entre dislocations.

Le modèle de Taylor (1934) est le premier fondement de la loi d'écroissage des métaux, avec le lien établi entre la cission critique de glissement et la racine carrée de la densité de dislocations totale présente dans le cristal:

$$\tau_c = \alpha \mu b \sqrt{\rho^t} \quad (I.7)$$

De cette forme isotrope, où α est un coefficient de proportionalité moyen pour tous les systèmes, plusieurs extensions ont fait l'objet de nombreux travaux, conduits par la nécessité de traduire au mieux le fait pressenti que tous les systèmes n'étaient pas identiquement écrois des lors que cette densité totale n'était pas isotropiquement répartie.

Les efforts étaient menés selon 2 pistes convergentes:

Une piste consistait à déterminer l'influence sur un système g d'une population de dislocations d'un même type k , c'est-à-dire à calculer $\tau_c^{gk} = \alpha^{gk} \mu b \sqrt{\rho^k}$ (SAA 1960, SAA 1961, FOR 1966, FRA 1984) puis à déterminer la loi de superposition des effets de chaque type d'obstacles, linéaire, quadratique, intermédiaire). Les coefficients d'interaction de cette matrice $[\alpha]$ étaient soit considérés comme provenant des interactions élastiques soit des interactions de contact qui seront par la suite établies comme déterminantes;

L'autre piste analysait l'interprétation de l'écroissage d'un système de glissement par la « forêt » des dislocations perçant son plan (KOC 1964, KOC 1966, FRA 1984) : cette notion de forêt induit que les dislocations propres du ou des système(s) actif(s), qui se multiplient intensivement pour satisfaire la déformation plastique, ne contribuent pas à l'écroissage propre de ce(s) système(s) et que de ce fait chaque système n'est écroi que par sa forêt propre.

Pour illustrer ce point, si on pose simplement que $\rho^{Fg} = \rho^t - \rho^g = \sum_{k \neq g} \rho^k$, en admettant pour

commencer que le coefficient de proportionnalité α s'applique à l'identique sur toutes les familles de dislocations on obtient d'emblée une anisotropie des cisssions critiques telle que $\tau_c^S = \alpha \mu b \sqrt{\rho^{FS}} > \tau_c^P = \alpha \mu b \sqrt{\rho^{FP}}$ dès lors que $\rho^P > \rho^S$, conforme à la grande majorité des observations d'un écrouissage supérieur des systèmes inactifs.

Un premier affinement de cet écrouissage forêt introduisit la variante distinguant les termes d'interaction entre systèmes coplanaires et non coplanaires plutôt que seulement la distinction de l'auto-écrouissage du reste des interactions, des systèmes coplanaires ne voyant qu'une même forêt.

Cette variante résulte simplement de poser $\rho^{Fg} = \rho^t - \sum_{P(g)} \rho^{P(g)} = \sum_{P(k) \neq P(g)} \rho^{P(k)}$ ou $P(g)$ désigne les systèmes du plan de g, de même écrouissage puisque de même forêt.

Pour introduire de possibles coefficients anisotropes d'interaction selon cette voie, il suffit de reprendre l'eq. I.7 de Taylor sous la forme $\tau_c = \mu b \sqrt{\alpha^2 \rho^t} = \mu b \sqrt{a \rho^t} = \mu b \sqrt{\rho^{teff}}$ avec le coefficient de proportionnalité intégré à la densité effective d'obstacles. Cela permet de lui substituer une densité effective d'obstacles distincte pour chaque système g sous la forme $\rho^{teff(g)} = \sum_k a^{gk} \rho^k$. Si les

contributions des systèmes d'un plan actif ne contribuent pas du tout à l'écrouissage de ce plan, il suffit de ne prendre nul les groupes de coefficients associés aux systèmes coplanaires. Si les différents types d'interactions méritent d'être pris en compte, la matrice des coefficients d'interaction prend la forme de la matrice géométrique de la section I.3.b, pour le glissement octaédrique de type CFC ou bien CC. Le nombre de coefficients différents est inférieur ou égal au nombre des interactions géométriques distinctes, dont on a vu qu'elles se limitent à 6, auto-interaction incluse pour les 12 systèmes octaédriques. On obtient la loi quadratique (**FRA 1982, FRA 1984**) :

$$\tau_c^g = \mu b \sqrt{\rho^{eff(g)}} = \mu b \sqrt{\sum_{k=1}^N a^{gk} \rho^k} \quad (I.8)$$

qui s'applique largement, avec une matrice de dimension *au moins* NxN puisqu'il peut s'ajouter aux N populations d'obstacles des systèmes de glissement des populations supplémentaires hors systèmes de glissement, dont les coefficients peuvent être considérés constants en première approximation.

Cette forme est quadratique au sens où elle résulte de la superposition quadratique des contraintes

$$\tau_c^{gk} = \alpha^{gk} \mu b \sqrt{\rho^k}, \text{ c'est-à-dire, } \tau_c^{g^2} = \sum_{k=1}^N \tau_c^{gk^2}.$$

Les calculs de dynamique des dislocations depuis les années 90 ont fixé les coefficients relatifs de cette matrice pour la structure CFC et ses 6 situations possibles, dans le cas de dislocations non dissociées (tel que dans Al par exemple) et un matériau élastiquement isotrope.

Ils ont aussi précisé la forme de la loi, en montrant que le coefficient constant implique un terme logarithmique lié à la tension de ligne des dislocations (**GOM 2006**), ce qui donne une forme plus rigoureuse de type :

$$\alpha_{ij} = 0.2 + 0.8 \alpha_{ij,ref} \left(\frac{\ln(b \sqrt{\alpha_{ij,ref} \rho_f})}{\ln(b \sqrt{\alpha_{ij,ref} \rho_{ref}})} \right)^2 \quad (\text{I.9})$$

Les coefficients d'interactions se définissent donc pour une densité de référence donnée et évoluent selon ce terme logarithmique à mesure que la densité de dislocation croît.

Les simulations DD rassemblent les interactions de type coplanaire et l'auto écrouissage en interactions dipolaires par opposition aux interactions de type jonction lorsque les dislocations ne glissent pas sur des plans parallèles. Parmi l'ensemble des interactions autres que dipolaires il a été établi par les simulations DD que les interactions entre systèmes colinéaires étaient les plus fortes (**KUB 2008**) alors qu'il s'agit d'une interaction de jonction dans lequel le produit de jonction disparaît. Ainsi le cas particulier où le produit de la jonction des deux dislocations interagissant est l'annihilation pure et simple des deux segments apparaît paradoxalement le plus durcissant. Cette supériorité avait échappé à tous les travaux expérimentaux, largement en raison du fait qu'il est impossible d'isoler expérimentalement une situation où une interaction colinéaire s'associe incontestablement à l'écrouissage constaté.

Dans le cas du glissement octaédrique pour la structure CFC comme pour la structure CC, il est retrouvé (en hypothèse d'élasticité isotrope toujours) que les interactions dipolaires « D » (faibles) et colinéaires « C » (fortes) diffèrent fortement, tandis que les autres interactions de type jonction « J » se situent toutes de manière intermédiaire. Typiquement, les écarts entre les types « D » < « J » d'une part et « J » < « C » d'autre part peuvent atteindre un ordre de grandeur chacun, alors qu'entre termes jonctions J1, J2, ..., les écarts sont plutôt d'un facteur de l'ordre de 2.

Compte tenu de l'augmentation du nombre de situations différentes si l'on ajoute les plans (112) pour la structure CC, le nombre d'interactions possibles est fortement accru. Sur un plan strictement géométrique, il en est dénombré 17 dans (**MAD 2004**). Le nombre peut augmenter jusqu'à 37 si on

suppose que l'asymétrie des systèmes (112) induit des différences dans les coefficients d'interaction, ceci est **discuté au chapitre III**.

a^i	1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12	13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24
1	1 2 3 3 4 5 5 6 4 5 6 5	7 8 9 9 10 11 12 13 10 11 13 12
2	2 1 3 3 5 4 6 5 5 4 5 6	8 7 9 9 11 10 13 12 11 10 12 13
3	3 3 1 2 5 6 4 5 6 5 4 5	9 9 7 8 12 13 10 11 13 12 10 11
4	3 3 2 1 6 5 5 4 5 6 5 4	9 9 8 7 13 12 11 10 12 13 11 10
5	4 5 5 6 1 3 2 3 4 6 5 5	10 12 11 13 7 9 8 9 10 13 11 12
6	5 4 6 5 3 1 3 2 6 4 5 5	12 10 13 11 9 7 9 8 13 10 12 11
7	5 6 4 5 2 3 1 3 5 5 4 6	11 13 10 12 8 9 7 9 11 12 10 13
8	6 5 5 4 3 2 3 1 5 5 6 4	13 11 12 10 9 8 9 7 12 11 13 10
9	4 5 6 5 4 6 5 5 1 3 3 2	10 12 13 11 10 13 12 11 7 9 9 8
10	5 4 5 6 6 4 5 5 3 1 2 3	12 10 11 13 13 10 11 12 9 7 8 9
11	6 5 4 5 5 5 4 6 3 2 1 3	13 11 10 12 12 11 10 13 9 8 7 9
12	5 6 5 4 5 5 6 4 2 3 3 1	11 13 12 10 11 12 13 10 8 9 9 7
13	7 8 9 9 10 12 11 13 10 12 13 11	1 14 15 15 4 16 16 17 4 16 17 16
14	8 7 9 9 12 10 13 11 12 10 11 13	14 1 15 15 16 4 17 16 16 4 16 17
15	9 9 7 8 11 13 10 12 13 11 10 12	15 15 1 14 16 17 4 16 17 16 4 16
16	9 9 8 7 13 11 12 10 11 13 12 10	15 15 14 1 17 16 16 4 16 17 16 4
17	10 11 12 13 7 9 8 9 10 13 12 11	4 16 16 17 1 15 14 15 4 17 16 16
18	11 10 13 12 9 7 9 8 13 10 11 12	16 4 17 16 15 1 15 14 17 4 16 16
19	12 13 10 11 8 9 7 9 12 11 10 13	16 17 4 16 14 15 1 15 16 16 4 17
20	13 12 11 10 9 8 9 7 11 12 13 10	17 16 16 4 15 14 15 1 16 16 17 4
21	10 11 13 12 10 13 11 12 7 9 9 8	4 16 17 16 4 17 16 16 1 15 15 14
22	11 10 12 13 13 10 12 11 9 7 8 9	16 4 16 17 17 4 16 16 15 1 14 15
23	13 12 10 11 11 12 10 13 9 8 7 9	17 16 4 16 16 16 4 17 15 14 1 15
24	12 13 11 10 12 11 13 10 8 9 9 7	16 17 16 4 16 16 17 4 14 15 15 1

Tableau I.5: Matrice d'interactions de MAD 2004

System number	1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12
Schmid and Boas	B5 C5 D6 A6 B4 C3 D4 A3 B2 C1 D1 A2
Burgers vectors \mathbf{b}	$\underline{111}$
Slip plane \mathbf{n}	$\underline{110}$ $\underline{110}$ $\underline{110}$ $\underline{110}$ $\underline{101}$ $\underline{101}$ $\underline{101}$ $\underline{101}$ $\underline{011}$ $\underline{011}$ $\underline{011}$ $\underline{011}$
System number	13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24
Schmid and Boas	B5' C5'' D6'' A6' B4' C3'' D4'' A3' B2' C1' D1'' A2'
Burgers vectors \mathbf{b}	$\underline{111}$
Slip plane \mathbf{n}	$\underline{112}$ $\underline{112}$ $\underline{112}$ $\underline{112}$ $\underline{121}$ $\underline{121}$ $\underline{121}$ $\underline{121}$ $\underline{211}$ $\underline{211}$ $\underline{211}$ $\underline{211}$

Tableau I.6 : Notion 24 systèmes de glissement de MAD 2004

a_i	1 2 3 4 5 6 7 8 9
β_j	- - 90.00 - 54.74 54.74 - 54.74 45.00
β_1	- - 54.74 0.00 70.53 70.53 0.00 70.53 35.26
β_2	- - 54.74 0.00 0.00 70.53 0.00 0.00 90.00
β_{12}	0.00 0.00 90.00 60.00 60.00 60.00 90.00 90.00 54.74
inter	self-hard dip junc annihil junc junc annihil junc junc
self-ener	1 2 3 4 5 6 4 5 7
mapping	- - a Ω_1 b_1 c Ω_2 b_2 d
a_i	10 11 12 13 14 15 16 17
β_j	- 54.74 72.45 72.45 90.00 90.00 59.53 25.24
β_1	0.00 70.53 79.98 29.50 90.00 39.23 28.56 58.52
β_2	0.00 0.00 58.52 58.52 90.00 39.23 72.98 58.52
β_{12}	30.00 30.00 73.22 73.22 70.53 48.19 80.41 33.56
inter	annihil junc junc junc junc junc junc junc
self-ener	4 5 8 9 10 11 12 13
mapping	Ω_3 b_3 e f g h i j

Tableau I.7: 17 D'interactions dans Fer-alpha selon MAD 2004

Pour compliquer la tâche déjà difficile, des travaux plus ou moins récents (**FRA 1982, MAD 2008**) attribuent rôle déterminant des interactions de second ordre dans la structure CC, c'est-à-dire les interactions d'une dislocation avec le produit (de type jonction) d'une interaction antérieure : alors que dans la structure CFC ces interactions semblent ne pas être d'un niveau supérieur au niveau des interactions fortes de premier ordre (cela peut néanmoins se produire dans des situations où les cisssions appliquées n'agiraient pas directement) il semblerait que dans la structure CC leur niveau soit supérieur aux interactions de premier ordre, ces dernières étant plus faibles que celles de la structure CFC. En résumé de cette remarque, les fortes interactions dans la structure CFC impliqueraient plutôt les interactions de premier ordre et plutôt celles de deuxième ordre pour la structure CC, ce qui pour cette dernière augmente énormément le nombre déjà important de configurations d'interactions.

Les valeurs types des coefficients obtenus des calculs de DD sont données dans le **Tableau I.8** pour les systèmes octaédriques (**QUE 2009**).

Systems	Interaction nature	Coefficient
(110)[1 $\bar{1}$ 1]	Dipolar	β_{dipo}
(110)[$\bar{1}$ 11]	Coplanar	β_{copla}
(0 $\bar{1}$ 1)[111], (101)[11 $\bar{1}$]	Mixed-symmetrical junction	β_{sim}
(10 $\bar{1}$)[111], (101)[$\bar{1}$ 11]	Mixed-asymmetrical junction	β_{asym}
(01 $\bar{1}$)[$\bar{1}$ 11], (011)[11 $\bar{1}$]		
(1 $\bar{1}$ 0)[111], ($\bar{1}$ 10)[11 $\bar{1}$]	Edge junction	β_{edge}
($\bar{1}$ 01)[1 $\bar{1}$ 1], (011)[1 $\bar{1}$ 1]	Collinear annihilation	β_{coli}

Interaction nature	Coefficients β	a (This work)	a (From Madec and Kubin, 2004)
Collinear	0.53 ± 0.04	0.72	0.55
Symmetrical junction	0.063 ± 0.006	0.09	0.06
Asymmetrical junction	0.036 ± 0.006	0.05	0.04
Edge junction	0.039 ± 0.005	0.06	0.045
Dipolar and coplanar interactions	0.0068 ± 0.001	–	–

Tableau I.8 : Les valeurs d'interactions par DD

Dans sa forme incrémentale, la loi quadratique d'écrouissage généralise la loi isotrope de Taylor:

$$d\tau_c = \alpha\mu b \frac{d\rho^t}{2\sqrt{\rho^t}} = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_c} \alpha^2 d\rho^t \quad (\text{I.10.a})$$

$$d\tau_c^g = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_c^g} \sum_{k=1,N} a^{gk} d\rho^k \quad (\text{I.10.b})$$

L'évolution de l'écrouissage avec la déformation plastique en termes de glissements nécessite d'exprimer l'évolution des densités individuelles ρ^k .

Cette évolution étant un bilan de multiplication (stockage) et d'annihilations :

$$d\rho^k(\gamma^1, \gamma^2, \dots, \gamma^N, X) = d\rho^{k(+)}(\gamma^1, \gamma^2, \dots, \gamma^N, X) - d\rho^{k(-)}(\gamma^1, \gamma^2, \dots, \gamma^N, X)$$

Le terme X représente de possibles variables autres que les glissements intervenant dans le bilan, comme par exemple la contrainte sur des systèmes où le seuil de plasticité n'est pas atteint mais où de la multiplication sans contribution au glissement pourrait néanmoins contribuer à l'écroutissement.

La complexité potentielle des lois de multiplication et d'annihilation dans ces approches est le plus souvent contournée sur la base d'hypothèses physiquement raisonnables mais qui restent des approximations.

Par exemple, prendre ces deux lois essentiellement dépendantes du glissement sur le système k de la population concernée signifie que d'une part le stockage indirect est négligeable et d'autre part les annihilations indirectes également. L'hypothèse est plus sévère pour le stockage que pour l'annihilation, où il est de surcroît raisonnable de supposer une loi d'annihilation par système proportionnelle à la densité de dislocation de ce système, sous la forme (**TAB 1997**) :

$$d\rho^{k(-)}(\gamma^k) \equiv \rho^k d\gamma^k .$$

Pour le stockage, l'hypothèse d'une dépendance en termes de libres parcours pour chaque système, stockage d'autant plus fort que ce libre parcours décroît, atténue l'hypothèse d'un stockage par système ne dépendant que du glissement sur celui-ci. Les formes le plus souvent retenues sont du type :

$$d\rho^{k(+)}(\gamma^k) = \frac{1}{bL^k} d\gamma^k \equiv \frac{\sqrt{\rho^{Fk*}}}{b} d\gamma^k \quad (\text{I.11})$$

Elles reintroduisent une notion de forêt de dislocations du système k dans l'expression des libre parcours L^k dont il n'est pas dit que ce soit exactement l'une de celles précédemment rencontrées (d'où l'astérisque). Avec encore plusieurs variantes sur cette formulation toujours en recherche d'améliorations, on peut néanmoins considérer que la plupart des modèles d'écroutissement des monocristaux pertinents intègrent une loi qui associe :

$$d\tau_c^g = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_c^g} \sum_{k=1, N} a^{gk} (d\rho^{k(+)}(\gamma^k) - d\rho^{k(-)}(\gamma^k)), \text{ et } d\rho^{k(+)}(\gamma^k) - d\rho^{k(-)}(\gamma^k) \equiv \left(\frac{\sqrt{\rho^{Fk*}}}{b} - C\rho^k \right) d\gamma^k .$$

Réintroduite dans la loi phénoménologique $\sum_{k=1}^N h^{gk} d\gamma^k$, cela conduit à une matrice d'écroutissement

$[h]$, non constante, non symétrique et très versatile, de modules instantanés définis par :

$$h^{gk} = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_c^g} a^{gk} k \left(\frac{\sqrt{\rho^{Fk*}}}{b} - C\rho^k \right) \quad (\text{I.12})$$

On retrouve bien qu'en l'absence de restauration et pour des cissions critiques peu différentes, un écroutissement linéaire est une approximation utilisable.

Parmi les choix ouverts de densité forêt pour définir les libres parcours intervenant, le choix de la densité effective $\rho^{eff(k)}$ pour k , permet d'introduire de manière simplificatrice la grandeur $\tau_c^k / \mu b$. Mais les récents travaux de DD ont montré une réalité plus complexe.

Mise à part la contrainte de Peierls, l'évolution de densité de dislocation de chaque système de glissement est donnée par $\frac{d\rho_i}{d\gamma^i} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L_i} - y_0 \rho_i \right)$ où y_0 est une constante à ajuster sur le stade de restauration de la courbe contrainte-déformation tandis que le libre parcours moyen L_i est pris de la forme :

$$\frac{1}{L_i} = k \frac{\tau_c^i}{b\mu}$$

Pour calculer le libre parcours moyen pour le Cuivre quand on a créé des jonctions, (KUB 2008) a proposée la formule:

$$\frac{1}{L_f} = \frac{\tau_c^i}{\mu b K_{hkl}} \quad \text{avec} \quad K_{hkl} = \left[\frac{n^{act} \sqrt{a} (1+k)^{3/2}}{\rho_0 k_0 (n^{act} - 1 - k)} \right] \quad (I.13)$$

Dans cette formule, n^{act} est le nombre des systèmes de glissement equisolllicités (n^{act} plus grand que 1, et le cas du glissement simple n'est pas inclus). ρ_0, k_0, k sont des constantes.

Pour le glissement double $K_{II} = 11$, et pour du glissement simple, ou colinéaire, ou coplanaire :

$$K_I = K_{copla} = K_{col} = 17 K_{II}$$

Le taux stockage s'écrit alors:

$$\frac{d\rho_i}{d\gamma^i} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L_f} + \frac{\sqrt{\alpha_{dipolaire} \rho_i}}{K_I} + \frac{\sum_{j \in copla(i)} \sqrt{\alpha_{copla} \rho_j}}{K_{copla}} \right) \quad (I.14)$$

Le taux d'annihilation des dislocations vis est défini dans le sens classique, par l'inverse du libre parcours moyen L_s [ESS 1979] soit :

$$(\delta\rho / \delta\gamma)_s = -1 / bL_s$$

Négligeable en stade I, l'annihilation de dislocations devient importante en changement de stade II linéaire à parabolique en stade III. La forme finale pour le taux de stockage s'écrit:

$$\frac{d\rho_i}{d\gamma^i} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L_f} + \frac{\sqrt{\alpha_{dipolaire} \rho_i}}{K_I} + \frac{\sum_{j \in copla(i)} \sqrt{\alpha_{copla} \rho_j}}{K_{copla}} - y^{hkl} \rho_i \right) \quad (I.15)$$

Les paramètres y^{hkl} qui caractérisent l'apparition du stade III dépendent de l'orientation et de τ_{III} . On a typiquement $y^{hkl} = 0.5nm$ [DEV 2008]. Dans notre cas d'étude du fer alpha ARMCO, des analyses MET par D. Caillard nous ont montré l'existence de précipités (carbure,..). S. Queyreau [QUE 2010] montre qu'ils augmentent la cission critique, et le taux stockage de dislocations. La cission critique s'écrit dans ce cas, avec la contrainte de Peierls τ_F :

$$\tau_c(i) = \mu b \sqrt{\sum_{j=1}^N \alpha_{ij} \rho_j} + \tau_F + \tau_P \quad (I.16)$$

avec également une influence sur le taux de stockage qui peut s'écrire :

$$\frac{d\rho_i}{d\gamma^i} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L_f} + \frac{\sqrt{\alpha_{dipolaire}\rho_i}}{K_I} + \frac{\sum_{j \in copla(i)} \sqrt{\alpha_{copla}\rho_j}}{K_{copla}} - y^{hkl} \rho_i \right) + \frac{r\pi^2 N_p}{2b} \quad (I.17)$$

avec r le rayon moyen des précipités et N_p la densité des précipités par unité d'aire.

Les apports de la DD au cas de la structure CFC ne s'étendent pas nécessairement à la structure CC. L'étude d'éventuelles différences reste à compléter. Dans ce travail nous nous réfèrerons aux informations apportées par la DD pour la structure CC quand elles existent et par défaut à celles apportées pour la structure CFC que nous étendrons au cas CC en tenant compte de ses spécificités. On remarquera notamment que le glissement dévié intervient d'une manière formelle particulière sur les termes d'interaction dipolaire. Cet effet est attendu d'autant plus sensible dans les cristaux où le nombre de mécanismes de glissement dévié est élevé, ce qui est une des grandes différences entre les structures CFC et CC. Nous y reviendrons.

La DD n'apporte notamment pas d'informations spécifiques lorsque des systèmes de glissement non symétriques peuvent être impliqués, comme c'est le cas des plans (112) en structure CC.

I.6.c. Autres composantes de la contrainte d'écoulement.

Dans le cas des métaux CC on a vu qu'à la contrainte due à la forêt s'ajoutait une contrainte de friction de réseau, contrainte de Peierls ou Peierls-Nabarro τ_c^{PN} . Enfin, en présence d'impuretés ou de carbures contribuera également une contrainte τ_c^I . Contrairement à la superposition quadratique des contraintes dues aux différentes familles de dislocations, la superposition telle qu'établie par des simulations (**BRO 1971, NEM 1996**) est plutôt de type linéaire :

$$\tau_c^g = \tau_c^{PN} + \sqrt{\sum_{k=1}^N \tau_c^{gk^2}} + \tau_c^I \quad (I.18)$$

La contrainte de Peierls est différente pour les plans (110) et les plans (112) et différentes sur ces derniers dans le sens facile et le sens difficile.

Dans le cas des essais réalisés dans ce travail, il sera nécessaire de prendre en compte à la fois une contribution de la contrainte de Peierls à la cission critique ainsi qu'une contribution due aux carbures.

I.7. Les équations constitutives du comportement élastoplastique du monocristal.

En associant un critère d'écoulement plastique de type Schmid avec la loi d'écrouissage microstructurale **eq. I.12**, la connaissance des conditions du chargement imposé permet de formuler une loi de comportement élastoplastique du monocristal, sans nécessité de formulation viscoplastique si l'on souhaite une forme régularisée. En restant dans un cadre de petites déformations, mais en tenant compte des rotations, nous posons le cadre d'une sollicitation générale qui est ensuite spécialisé pour les sollicitations uniaxiales des essais qui ont été menés.

On considère un volume V de cristal « parfait » au sens où, malgré ses défauts ponctuels et dislocatifs, le réseau cristallin du domaine est considérée d'orientation exactement déterminée (effet nul en moyenne des défauts présents). On considère pour ce cristal, un ensemble N de systèmes de glissement non nécessairement identiques, définis par \mathbf{n}^g et \mathbf{m}^g , les vecteurs unitaires selon la normale au plan de glissement et la direction de glissement respectivement. Puisque la maille est supposée globalement parfaite dans V , les tenseurs de Schmid sont définis en tout point de V par la partie symétrique du produit dyadique $\mathbf{R}^g = \left\{ \mathbf{m}^g \otimes \mathbf{n}^g \right\}$.

Pour chaque système on définit en tout point \mathbf{r} de V , $\tau_c^g(\mathbf{r})$ et $\tau^g(\mathbf{r})$, la cission critique instantanée (telle que $\tau_c^g(\mathbf{r}) \geq \tau_0^g > 0$, par rapport aux cissions critiques initiales) et la cission résolue instantanée, toujours non négative par convention sur un système censé produire aussi un glissement positif, qui s'écrit:

$$\tau^g(\mathbf{r}) = \mathbf{n}^g \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) \mathbf{m}^g = \left\{ \mathbf{m}^g \otimes \mathbf{n}^g \right\} : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) = \mathbf{R}^g : \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) \quad (\text{I.19})$$

La loi élastique de Hooke généralisée à l'élasticité anisotrope permet toujours d'écrire

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{r}) = \mathbf{C}(\mathbf{r}) : (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\varepsilon}^P(\mathbf{r})) = \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r}) - \boldsymbol{\varepsilon}^P(\mathbf{r})) \quad (\text{I.20})$$

avec $\mathbf{C}(\mathbf{r}) = \mathbf{C}$ le tenseur des modules d'élasticité pris uniforme dans V , $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{r})$ la déformation totale et $\boldsymbol{\varepsilon}^P(\mathbf{r})$ la déformation plastique en \mathbf{r} .

On note $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\beta}_{ij}(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\beta}_{ji}(\mathbf{r}))$ et $\boldsymbol{\beta}_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{\partial u_i(\mathbf{r})}{\partial x_j}$ où $u_i(\mathbf{r})$ est le déplacement.

Le monocristal est considéré comme ayant un comportement homogène en première approximation, le chapitre VI soulignant que malgré les apparences topographiques l'hypothèse est raisonnable du moins en glissement monoplainaire. Cela revient à ce stade à substituer à toutes les grandeurs locales, une grandeur macroscopique moyenne $\bar{x} = \frac{1}{V} \int_V x(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ et à négliger les écarts à cette

moyenne. En toute rigueur, on devrait plutôt considérer des grandeurs macroscopiques effectives, si des hétérogénéités de comportement du monocristal devaient être prises en compte.

On note la contrainte macroscopique Σ et la déformation totale (élastoplastique) macroscopique \mathbf{E} . Un incrément de contrainte $d\Sigma$ ou de déformation totale $d\mathbf{E}$ s'appliquant, satisfait les relations :

$$d\Sigma = \mathbf{C} : d\mathbf{E} \text{ si } d\mathbf{E}^p = 0 \quad ; \quad d\Sigma = \mathbf{C} : (d\mathbf{E} - d\mathbf{E}^p) \text{ si } d\mathbf{E}^p = \sum_{k=1}^N \mathbf{R}^k d\gamma^k$$

où \mathbf{E}^p est la déformation plastique et les incréments de glissement sont par convention non négatifs.

I.7.a. La loi de Schmid généralisée.

La loi de Schmid généralisée à tout instant de l'écoulement plastique, peut s'écrire :

$$\max \left(\frac{\tau^g}{\tau_c^g} - 1 \right) = \max (F^g) = 0 \quad (\text{I.21.a})$$

pour les P systèmes de N qui sont susceptibles de participer à l'écoulement (systèmes potentiels) et :

$$\max (dF^g) = 0 \quad (\text{I.21.b})$$

pour les n systèmes parmi P qui seront actifs sur l'incrément.

Les dérivées partielles dans ce système de n équations (pour n inconnues $d\gamma^k$ au moins) s'écrivent en utilisant:

$$\tau^g, \Sigma = \mathbf{R}^g \quad ; \quad \tau^g, \gamma^k = (\mathbf{R}^g, \gamma^k) : \Sigma \quad ; \quad \tau_c^g, \gamma^k = h^{gk},$$

et la matrice [h] est la matrice d'écrouissage sous la forme :

$$d\tau_c^g = \sum_k^N h^{gk} d\gamma^k \quad . \quad (\text{I.22})$$

Les modules de la matrice d'écrouissage sont explicités selon l'approche microstructurale retenue, en adéquation avec la présentation précédemment faite.

Le système à résoudre s'écrit donc pour $g \in n$, et n étant a priori toute combinaison de n systèmes pris dans P, si $d\Sigma$ est entièrement imposé :

$$\mathbf{R}^g : d\Sigma = \sum_{k=1}^P (h^{gk} - (\mathbf{R}^g, \gamma^k) : \Sigma) d\gamma^k = \sum_{k=1}^P H_{\Sigma}^{gk} d\gamma^k \quad (\text{I.23})$$

les autres systèmes devant satisfaire aux inégalités $dF^g < 0$.

Si les déformations totales sont toutes imposées via $d\mathbf{E}$, le système devient :

$$\mathbf{R}^g : \mathbf{C} : d\mathbf{E} = \sum_{k=1}^P (h^{gk} - (\mathbf{R}^g, \gamma^k) : \Sigma) d\gamma^k + \sum_{k=1}^N \mathbf{R}^g : \mathbf{C} : \mathbf{R}^k d\gamma^k = \sum_{k=1}^P H_E^{gk} d\gamma^k \quad (\text{I.24})$$

avec les inégalités complémentaires associées.

Dans le cas d'une sollicitation mixte où l'on impose K composantes du tenseur $d\Sigma$ et les $6-k$ composantes complémentaires du tenseur dE mixte générale on décomposera $\mathbf{R}^g : d\Sigma$ en $\mathbf{R}_{ab}^g d\Sigma_{ab}^\circ + \mathbf{R}_{a'b'}^g d\Sigma_{a'b'}^*$, en écrivant séparément pour les termes imposés ($^\circ$) et non imposés (*) de contrainte:

$$d\Sigma_{ab}^\circ = C_{abcd} dE_{cd}^* + C_{abc'd'} dE_{c'd'}^\circ - C_{abkl} \sum_{h=1}^N \mathbf{R}_{kl}^h d\gamma^h \quad (\text{I.25.a})$$

$$d\Sigma_{a'b'}^* = C_{a'b'cd} dE_{cd}^* + C_{a'b'c'd'} dE_{c'd'}^\circ - C_{a'b'kl} \sum_{h=1}^N \mathbf{R}_{kl}^h d\gamma^h \quad (\text{I.25.b})$$

soit, de la première partie $dE_{cd}^* = (C_{abcd})^{-1} \left(d\Sigma_{ab}^\circ - C_{abc'd'} dE_{c'd'}^\circ + C_{abkl} \sum_{h=1}^N \mathbf{R}_{kl}^h d\gamma^h \right)$

introduite dans la seconde :

$$d\Sigma_{a'b'}^* = C_{a'b'cd} (C_{abcd})^{-1} d\Sigma_{ab}^\circ + (C_{a'b'c'd'} - C_{a'b'cd} (C_{abcd})^{-1} C_{abc'd'}) dE_{c'd'}^\circ - (C_{a'b'kl} - C_{a'b'cd} (C_{abcd})^{-1} C_{abkl}) \sum_{h=1}^N \mathbf{R}_{kl}^h d\gamma^h$$

qu'on écrit sous la forme $d\Sigma_{a'b'}^* = D_{a'b'ab} d\Sigma_{ab}^\circ + G_{a'b'c'd'} dE_{c'd'}^\circ - G_{a'b'kl} \sum_{h=1}^N \mathbf{R}_{kl}^h d\gamma^h$ ou :

$$d\Sigma^* = \mathbf{D}^{*\circ} : d\Sigma^\circ + \mathbf{G}^{*\circ} : dE^\circ - \mathbf{G}^* : \sum_{h=1}^N \mathbf{R}^h d\gamma^h \quad (\text{I.26})$$

Le système devient :

$$(\mathbf{R}^{g^\circ} + \mathbf{R}^{g^*} : \mathbf{D}^{*\circ}) : d\Sigma^\circ + \mathbf{R}^{g^*} : \mathbf{G}^{*\circ} : dE^\circ = \sum_{k=1}^P (h^{gk} - (\mathbf{R}^g, \gamma^k) : \Sigma + \mathbf{R}^{g^*} : \mathbf{G}^* : \mathbf{R}^k) d\gamma^k = \sum_{k=1}^P H_{\Sigma E}^{gk} d\gamma^k.$$

Dans tous les cas, la résolution nécessite l'inversion d'une matrice d'érouissage effectif, qui contient à côté des modules de l'érouissage physiques, des termes liés à la rotation du réseau cristallin et à la déformation élastique.

Selon les conditions de sollicitation et le groupe des systèmes potentiels, la solution n'est pas

nécessairement unique. La solution de travail plastique minimal $\sum_{k=1}^P \tau_c^k d\gamma^k$ constitue un critère de

sélection. Il peut s'avérer qu'il soit insuffisant (plusieurs solutions restant encore équivalentes sans se déduire l'une de l'autre par simple symétrie), auquel cas divers critères de second ordre ont été proposés (**REN 1981, FRA 1982, PET 2005**).

I.7.b. La loi de Schmid régularisée.

En comparaison de cette formulation classique, la forme élastoplastique régularisée (**GAM 1991**) s'écrit:

$$F = \left(\left(\sum_{g=1}^N \left(\frac{\tau^g}{\tau_c} \right)^n \right)^{\frac{1}{n}} - 1 \right) = 0 \quad , \quad dF = 0, \quad (I.27)$$

et les dérivées partielles impliquées s'écrivent:

$$F, \Sigma = \sum_g \left(\frac{\tau^g}{\tau_c} \right)^{n-1} \frac{\mathbf{R}^g}{\tau_c} = \sum_g P^g \mathbf{R}^g = \mathbf{N} \quad (I.28.a)$$

$$F, \gamma^k = \sum_g \left(\frac{\tau^g}{\tau_c} \right)^{n-1} \left(\frac{\tau^g}{\tau_c}, \gamma^k \right) = - \sum_g P^g \tilde{\mathbf{H}}_{\Sigma}^{gk} \quad (I.28.b)$$

avec $\tilde{\mathbf{H}}_{\Sigma}^{gk} = h^{gk} \left(\frac{\tau^g}{\tau_c} \right) - (\mathbf{R}^g, \gamma^k) : \Sigma$.

La différence de $[\tilde{\mathbf{H}}_{\Sigma}]$ avec $[\mathbf{H}_{\Sigma}]$ de la loi de Schmid classique est que ici la matrice NxN entière $[h]$ est considérée, mais les termes associés à un coefficient tel que $\left(\frac{\tau}{\tau_c} \right)^n \ll 1$ y sont négligeables. Avec $d\mathbf{E}^P = (F, \Sigma)d\lambda = \mathbf{N} d\lambda$, on obtient les incréments de glissement:

$$d\gamma^k = (\mathbf{F}, \tau^k) d\lambda = P^k d\lambda$$

Le multiplicateur plastique prend la forme $d\lambda = \frac{\mathbf{N} : d\Sigma}{H_{\Sigma}}$.

Pour des contraintes entièrement appliquées il vient:

$$H_{\Sigma} (d\lambda)^2 = \sum_g \sum_k P^g \tilde{\mathbf{H}}_{\Sigma}^{gk} P^k (d\lambda)^2 = \sum_g \sum_k \tilde{\mathbf{H}}_{\Sigma}^{gk} d\gamma^k d\gamma^g \quad (I.29)$$

L'incrément de déformation plastique et le tenseur instantané (tangent) des modules élastoplastiques s'écrivent finalement:

$$d\mathbf{E}^P = \sum_g \mathbf{R}^g d\gamma^g = \mathbf{N} d\lambda = \sum_g \sum_k \frac{\mathbf{R}^g P^g P^k (\mathbf{R}^k : d\Sigma)}{H_{\Sigma}} = \mathbf{L}^P : d\Sigma \quad (I.30)$$

Si on impose l'incrément de déformation totale on obtient $d\lambda = \frac{\mathbf{N} : (\mathbf{C} : d\mathbf{E})}{H_E}$,

avec la matrice $\tilde{\mathbf{H}}_E^{gk} = \tilde{\mathbf{H}}_{\Sigma}^{gk} + \mathbf{R}^g : \mathbf{C} : \mathbf{R}^k$ et $H_E (d\lambda)^2 = (H_{\Sigma} + \mathbf{N} : \mathbf{C} : \mathbf{N}) (d\lambda)^2 = \sum_g \sum_k \tilde{\mathbf{H}}_E^{gk} d\gamma^k d\gamma^g$.

Le cas d'une sollicitation mixte où l'on impose k composantes du tenseur $d\Sigma$ et les 6-k

composantes complémentaires du tenseur $d\mathbf{E}$ aboutit à la forme mixte générale telle que

$$\text{conformément à la loi de Schmid } d\lambda = \frac{\mathbf{N} : (d\Sigma^\circ + \mathbf{D}^{*\circ} : d\Sigma^\circ + \mathbf{G}^{*\circ} : d\mathbf{E}^\circ)}{H_{\Sigma E}} \text{ avec :}$$

$$\mathbf{R}^{g^\circ} : d\Sigma^\circ + \mathbf{R}^{g^*} : (\mathbf{D}^{*\circ} : d\Sigma^\circ + \mathbf{G}^{*\circ} : d\mathbf{E}^\circ) = \sum_{k=1}^P (h^{gk} - (\mathbf{R}^g, \gamma^k) : \Sigma + \mathbf{R}^{g^*} : \mathbf{G}^* : \mathbf{R}^k) d\gamma^k = \sum_{k=1}^P H_{\Sigma E}^{gk} d\gamma^k$$

$$\text{et avec la matrice } \tilde{H}_{\Sigma E}^{gk} = \tilde{H}_{\Sigma}^{gk} + \mathbf{R}^{g^*} : \mathbf{G}^* : \mathbf{R}^k \text{ telle que } H_{\Sigma E} (d\lambda)^2 = \sum_g \sum_k \tilde{H}_{\Sigma E}^{gk} d\gamma^k d\gamma^g.$$

En comparaison à la loi de Schmid usuelle, tous les systèmes contribuent pour une part, la résolution ne nécessite pas d'inversion de matrice mais seulement des sommations simple et double.

Cette régularisation s'apparente à la formulation viscoplastique avec l'avantage de préserver un domaine élastique et la notion de seuil et donc de surface de charge sans ajout supplémentaire.

Ces régularisations traduisent une interaction entre les systèmes de glissement dont l'intensité est graduée par la valeur de l'exposant.

D'autres régularisations traduisant les interactions entre certains sous groupes de systèmes dans un cristal CC sont présentées dans ce travail et examinées dans **le chapitre III**.

I.7.c. Sollicitation uniaxiale et conditions aux limites.

- Sollicitation uniaxiale

Si le chargement est imposé en contrainte axiale, axe \mathbf{e}_3 par exemple, les autres contraintes étant imposées nulles par définition, le tenseur des contraintes est entièrement imposé et on a pour la loi de Schmid généralisée le système :

$$\mathbf{R}_{33}^g d\Sigma_{33} = \sum_{k=1}^P H_{\Sigma}^{gk} d\gamma^k = \sum_{k=1}^P (h^{gk} - (\mathbf{R}_{33}^g, \gamma^k) \Sigma_{33}) d\gamma^k \quad (\text{I.31})$$

et pour la loi régularisée :

$$d\lambda = \frac{N_{33} d\Sigma_{33}}{H_{\Sigma}} = \frac{1}{H_{\Sigma}} \sum_g \left(\frac{\tau^g}{\tau_c^g} \right)^{n-1} \frac{R_{33}^g d\Sigma_{33}}{\tau_c^g} \quad (\text{I.32})$$

$$\tilde{H}_{\Sigma}^{gk} = h^{gk} \left(\frac{\tau^{g(l)}}{\tau_c^{g(l)}} \right) - (\mathbf{R}_{33}^g, \gamma^k) \Sigma_{33} \quad (\text{I.33})$$

Si on impose la déformation totale axiale, les autres conditions restant la nullité des contraintes autres que axiale, on est dans un cadre mixte avec pour la loi de Schmid généralisée :

$$\mathbf{R}_{33}^{g^*} \mathbf{G}_{3333}^{*\circ} d\mathbf{E}_{33}^\circ = \sum_{k=1}^P (h^{gk} - (\mathbf{R}_{33}^{g^*}, \gamma^k) \Sigma_{33} + \mathbf{R}_{33}^{g^*} \mathbf{G}_{33}^* : \mathbf{R}^k) d\gamma^k = \sum_{k=1}^P H_{\Sigma E}^{gk} d\gamma^k$$

$$\text{où } \mathbf{G}_{3333}^{*\circ} = C_{3333} - C_{33cd} (C_{abcd}^{(33)})^{-1} C_{ab33}^\circ ; \quad \mathbf{G}_{33kl}^* = C_{33kl} - C_{33cd} (C_{abcd}^{(33)})^{-1} C_{abkl}^\circ$$

et avec $C_{abcd}^{(33)}$ la sous-matrice 5x5 du tenseur d'élasticité \mathbf{C} privé, en dimension 6x6, de sa ligne 3=33 et de sa colonne 3=33.

La solution pour la forme Régularisée mixte dans ce cas s'obtient de $d\lambda = \frac{N_{33} \mathbf{G}_{3333}^{*o} dE_{33}^o}{H_{\Sigma E}}$

avec $\tilde{\mathbf{H}}_{\Sigma E}^{gk} = \tilde{\mathbf{H}}_{\Sigma}^{gk} + \mathbf{R}_{33}^{g*} \mathbf{G}_{33}^* : \mathbf{R}^k$.

- Conditions aux limites.

Dans toutes ces options, les seuls termes restant à fixer sont les termes $\mathbf{R}_{33}^{g*}, \gamma^k$.

D'après l'expression des termes du tenseur de Schmid

$$d\mathbf{R}_{ij}^g = \frac{1}{2} \left(m_i^g dn_j^g + dm_i^g n_j^g + m_j^g dn_i^g + dm_j^g n_i^g \right) \quad (\text{I.34})$$

La variation de ces termes est fonction de la rotation du réseau cristallin, qui elle-même dépend de la rotation totale et de la rotation plastique :

$$d\boldsymbol{\omega}^L = d\boldsymbol{\omega} - d\boldsymbol{\omega}^P = \begin{bmatrix} 0 & d\omega_{12}^L & d\omega_{13}^L \\ -d\omega_{12}^L & 0 & d\omega_{23}^L \\ -d\omega_{13}^L & -d\omega_{23}^L & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & d\omega_3^L & d\omega_2^L \\ -d\omega_3^L & 0 & d\omega_1^L \\ -d\omega_2^L & -d\omega_1^L & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{I.35})$$

$$\text{avec } d\omega_{ij} = \frac{1}{2} (u_{i,j} - u_{j,i}) \quad ; \quad d\omega_{ij}^P = \sum_g \Omega_{ij}^g d\gamma^g = \frac{1}{2} \sum_g (m_i^g n_j^g - m_j^g n_i^g) d\gamma^g$$

$$\text{On a par définition } d\mathbf{m}^g = \boldsymbol{\omega}^L \wedge \mathbf{m}^g \quad ; \quad d\mathbf{n}^g = \boldsymbol{\omega}^L \wedge \mathbf{n}^g \quad (\text{I.36})$$

ce qui donne , en prenant trois indices i,p,q et j,r,s dans l'ordre d'un trièdre direct

$$dx_i^g = \omega_p^L x_q^g - \omega_q^L x_p^g \quad , \quad dx_j^g = \omega_r^L x_s^g - \omega_s^L x_r^g \quad ,$$

$$d\mathbf{R}_{ij}^g = \frac{1}{2} \left(m_i^g (\omega_r^L n_s^g - \omega_s^L n_r^g) + (\omega_p^L m_q^g - \omega_q^L m_p^g) n_j^g + m_j^g (\omega_p^L n_q^g - \omega_q^L n_p^g) + (\omega_r^L m_s^g - \omega_s^L m_r^g) n_i^g \right) \quad (\text{I.37a})$$

$$d\mathbf{R}_{33}^g = m_3^g (\omega_1^L n_2^g - \omega_2^L n_1^g) + (\omega_1^L m_2^g - \omega_2^L m_1^g) n_3^g = \omega_1^L (m_3^g n_2^g + m_2^g n_3^g) - \omega_2^L (m_3^g n_1^g + m_1^g n_3^g) \quad (\text{I.37b})$$

La rotation totale est un élément des conditions aux limites.

En sollicitation uniaxiale, si on se sert souvent de l'hypothèse de rotation totale nulle, telle que

$d\boldsymbol{\omega}^L = -d\boldsymbol{\omega}^P$, cette condition est généralement trop sévère.

Les montages des essais sont tels qu'en traction uniaxiale, seules les fibres de matière selon la direction axiale x3 sont assujetties à ne pas se désaxer et à ne pas tourner, ce qui correspond aux conditions sur le gradient de déplacements et donc pour les parties déformation et rotation (**HAV 1978, BAC 1992**) :

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{bmatrix} 0 & u_{1,2} & u_{1,3} = 0 \\ u_{1,2} & 0 & u_{2,3} = 0 \\ u_{3,1} & u_{3,2} & 0 \end{bmatrix}; \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} 0 & u_{1,2} & \frac{u_{3,1}}{2} \\ u_{1,2} & 0 & \frac{u_{3,2}}{2} \\ \frac{u_{3,1}}{2} & \frac{u_{3,2}}{2} & 0 \end{bmatrix}; \boldsymbol{\omega} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\varepsilon_{13} \\ 0 & 0 & -\varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} & \varepsilon_{23} & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{I.38})$$

Pour une compression axiale, ce sont les plans matériels qui sont assujettis à rester orthogonaux à l'axe de compression x_3 , ce qui correspond à (**HAV 1978**) :

$$\nabla \mathbf{u} = \begin{bmatrix} 0 & u_{1,2} & u_{1,3} \\ u_{1,2} & 0 & u_{2,3} \\ u_{3,1} = 0 & u_{3,2} = 0 & 0 \end{bmatrix}; \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} 0 & u_{1,2} & \frac{u_{1,3}}{2} \\ u_{1,2} & 0 & \frac{u_{2,3}}{2} \\ \frac{u_{1,3}}{2} & \frac{u_{2,3}}{2} & 0 \end{bmatrix}; \boldsymbol{\omega} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \varepsilon_{13} \\ 0 & 0 & \varepsilon_{23} \\ -\varepsilon_{13} & -\varepsilon_{23} & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{I.39})$$

En première approximation, si on néglige la déformation élastique devant la déformation plastique, on obtient en traction (et par inversion de signe en compression):

$$\boldsymbol{\omega} \approx \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\varepsilon_{13}^P \\ 0 & 0 & -\varepsilon_{23}^P \\ \varepsilon_{13}^P & \varepsilon_{23}^P & 0 \end{bmatrix} \quad (\text{I.40})$$

En traitant le cas de l'essai de traction,

$$d\mathbf{R}_{33}^g = (\omega_1 - \omega_1^P)(\mathbf{m}_3^g \mathbf{n}_2^g + \mathbf{m}_2^g \mathbf{n}_3^g) - (\omega_2 - \omega_2^P)(\mathbf{m}_3^g \mathbf{n}_1^g + \mathbf{m}_1^g \mathbf{n}_3^g) \quad (\text{I.41.a})$$

$$d\mathbf{R}_{33}^g = -(\varepsilon_{23}^P + \omega_{23}^P)(\mathbf{m}_3^g \mathbf{n}_2^g + \mathbf{m}_2^g \mathbf{n}_3^g) + (\varepsilon_{13}^P + \omega_{13}^P)(\mathbf{m}_3^g \mathbf{n}_1^g + \mathbf{m}_1^g \mathbf{n}_3^g) \quad (\text{I.41.b})$$

$$\mathbf{R}_{33}^g, \gamma^k = -\mathbf{m}_2^k \mathbf{n}_3^k (\mathbf{m}_3^g \mathbf{n}_2^g + \mathbf{m}_2^g \mathbf{n}_3^g) + \mathbf{m}_1^k \mathbf{n}_3^k (\mathbf{m}_3^g \mathbf{n}_1^g + \mathbf{m}_1^g \mathbf{n}_3^g) \quad (\text{I.41.c})$$

avec le signe contraire en compression.

I.8. Références bibliographiques du Chapitre I.

- [**ARM 1991**]: Arminjon, M., 1991. A regular form of the Schmid law, application to the ambiguity problem. *Textures and Microstructures* 14-18, 1121-1128.
- [**BAC 1992**]: B. Bacroix, P. Franciosi and A. Mecif, (1992). On the fcc single crystals hardening stages and plasticity kinematics at various temperatures. *International Symposium on Materials Science: modelling of Plastic Deformation and its Engineering Applications*.
- [**BAS 2001**]: J.L. Bassani, K. Ito, V. Vitek, 2001, Complex macroscopic plastic flow arising from non-planar dislocation core structures. *Materials Science and Engineering A319–321 (2001)* 97–101
- [**BRO 1971**] L. M. Brown, Ham dans A. Kelly and R.B. Nicholson, éditeurs, *Strengthening Methods in Solids*, Applied Science Publishers, Barking, Essex (1971).
- [**BUL 2006**]: Bulatov V., Hsiung L., Tang M., Arsenlis A., Bartelt M., Cai W., Florando J., Hiratani M., Rhee M., Hommes G., Pierce T., de la Rubia T., 2006. Dislocation multi-junctions and strain hardening *Nature letters*, 440, 1174-1178.
- [**CAI 2005**] : Busso, EP; Cailletaud, G 2005. On the selection of active slip systems in crystal plasticity. *International journal of plasticity* Volume: 21 Issue: 11 Pages: 2212-2231.
- [**CAN 1984**]: Canova, GR; Kocks, UF; Jonas, JJ. 1984. Theory of torsion texture development. *Acta Metallurgica* Vol. 32, Issue: 2, Pages: 211-226.
- [**CAS 2006**]: O. Castelnau, R. Brenner, R.A. Lebensohn, 2006. The effect of strain heterogeneity on the work hardening of polycrystals predicted by mean-field approaches. *Acta Materialia* 54 (2006) 2745–2756.
- [**DEV 2008**]: Devincre B, Hoc T, Kubin L. *Science* 2008;320:1745.
- [**DOM 2005**]: C. Domain, G. Monnet, *Phys. Rev. Lett.*, 95, 215506 (10) (2005).
- [**DUE 1984**]: M.S. Duesbery, *Proc. Roy. Soc. London A* 392 (1984) 145.
- [**DUE 2002**]: M.S. Duesbery, V. Vitek, J. Cserti, 2002, in: C.J. Humphreys (Ed.), *Understanding Materials: A Festschrift for Sir Peter Hirsch*, The Institute of Materials, London, 2002, p. 165.
- [**ESS 1979**]: Essmann U, Mughrabi H. *Philos Mag A* 1979; 40:731
- [**FOR 1966**]: A.J.E. Foreman and M.J. Makin, 1966. Dislocation movement through random arrays of obstacles. *Pil. Mag.*, 14: 911-924.
- [**FRA 1982**] : P. Franciosi and A. Zaoui. *Acta Metall.*, 30 :2141–2151, 1982.
- [**FRA 1984**]: P. Franciosi. *Etude théorique et expérimentale du comportement élastoplastique des monocristaux métalliques se déformant par glissement : modélisation pour un chargement complexe quasi statique*. thèse, Université Paris 13, 1984.
- [**FRA 1991**] : Franciosi, P., Zaoui, A., 1991. Crystal Hardening and the Issue of Uniqueness. *International Journal of Plasticity* 4, 295-311.

- [**GAM 1991**]: Gambin W., 1991. Plasticity of crystals with interacting slip systems Eng. Trans. 39 (3/4), 303-324.
- [**GAM 1997**]: W.Gambin , F.Barlat. 1997. Modeling of deformation texture development based on rate independent crystal plasticity. International Journal of Plasticity, Vol.13, No. ½, pp.75-85, 1997.
- [**GOM 2006**]: Go´mez-Garcı´a D, Devindre B, Kubin LP. Phys Rev Lett 2006;96(12):125503.
- [**GRO 2008**]: Groger R., Bailey A.G., Vitek V., 2008. Multiscale modeling of plastic deformation of molybdenum and tungsten: I. Atomistic studies of the core structure and glide of 1/2h111i screw dislocations at 0°K. Acta Materialia 56 , 5401–5411
- [**HAV 1978**]: Havner, K. S. (1978). On unifying concepts in plasticity theory and related matters in numerical analysis. Nucl. Engr. Design 46: 187-201.
- [**HAV 1979**]: Havner, K.S 1979. The kinematics of double slip with application to cubic crystals in the compression test. J. Mech. Phys. Solids 27: 415-29.
- [**ITO 2001**] : K. Ito, V. Vitek, Philos. Mag. A 81 (2001) 1387.
- [**JAO 1965**]: Bernard Jaoul 1965, Étude de la plasticité et application aux métaux.
- [**KOC 1964**]: Kocks, U.F. (1964). Latent hardening and secondary slip in aluminum and silver. Trans. Met. Soc. AIME 230: 1160-7.
- [**KOC 1966**]: Kocks, U.F. & Brown, T.J. (1966). Latent hardening in aluminium. Acta Met. 14:87-98.
- [**KUB 2008**]: L. Kubin, B. Devindre, T. Hoc, 2008. Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals, Acta. Mater., elsevier, 6040-6049, 2008.
- [**MAD 2004**]: Ronan Madec, L.P. Kubin, 2004. Dislocation interactions and symmetries in bcc crystals.
- [**MAD 2008**]: Ronan Madec, Ladislav P. Kubin 2008. Second-order junctions and strain hardening in bcc and fcc crystals.. Scripta Materialia 58. 767–770.
- [**NEM 1996**]: E. Nembach, dans “Particle strengthening of metals and alloys”, New York, Wiley (1996).
- [**ORL 1990**]: B. Orland-Joliet, J. H. Driver and F. Montheillet, 1990. Plane strain compression of silicon-iron single crystals. Acta metall. Mater. Vol. 38, No. 4, pp. 581-594.
- [**PEI 1982**]: D.Peirce, R.J.Asaro, A.Needleman 1982. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals.. Acta Metallurgica Volume 30, Issue 6, June 1982, Pages 1087-1119.
- [**PET 2005**]: Petryk H., 2005. Thermodynamic conditions for stability in materials with rate-independent dissipation. Phil. Trans. R. Soc. A, 363, 2479–2515
- [**PET 2005**]: Petryk H., 2005. Thermodynamic conditions for stability in materials with rate-independent dissipation. Phil. Trans. R. Soc. A, 363, 2479–2515

- [**QIN 1992**]: Qing Qin, John L. Bassani, 1992. Non-schmid yield behavior in single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Volume 40, Issue 4, May 1992, Pages 813-833.
- [**QUE 2009**]: Sylvain Qiereau, Ghiath Monnet, Benoît Devincere, (2009). Slip systems interactions in alpha-iron determined by dislocation dynamics simulations. *International Journal of Plasticity* 25 (2009) 361-377.
- [**QUE 2010**]: Sylvain Queyreau, Ghiath Monnet, Benoit Devincere, (2010). Orowan strengthening and forest hardening superposition examined by dislocation dynamics simulations. *Acta Materialia* 58 (2010) 5586-5595.
- [**REN 1981**]: Renouard, M. and Wintenberger, M. , (1981). *C. r. Acad. Sci. Paris*, B292, 385.
- [**SAA 1960**]: Saada, G. 1960. Sur le durcissement du a la recombinaison des dislocations. *Acta metallurgica* Vol. 8, Issue 12, Pages 841-847.
- [**SAA 1961**]: Saada, G. 1961. Interaction de dislocations, écrouissage et production de défauts ponctuels dans les métaux c.f.c. *Acta Metallurgica* Vol. 9, Issue 2, Pages 166-168.
- [**SEE 2001**]: Alfred Seeger, 2001. Why anomalous slip in body-centred cubic metals?. *Materials Science and Engineering* A319–321 (2001) 254–260
- [**TAB 1997**]: Tabourot, L. Fivel, M. Rauch, E. (1997). Generalised constitutive laws for fcc single crystals. *Materials science and engineering – Structural materials properties microstructure and processing* Vol. 234, Pages: 639-642.
- [**TAY 1923**]: Taylor and Elam (Bakerian Lecture), *Proc Roy. Soc., A*, **102**, pp. 643–667 ; 1923.
- [**TAY 1925**]: Taylor and Elam, *Proc Roy. Soc., A*, **108**, pp. 28–51 ; 1925.
- [**TAY 1926**]: Taylor and Farren, *Proc. Roy. Soc., A*, **111**, pp. 529–551 ; 1926.
- [**VIT 2004**]: V. Vitek, M. Mrovec, J.L. Bassani, 2004, Influence of non-glide stresses on plastic flow: from atomistic to continuum modelling. *Materials Science and Engineering* A365 (2004) 31–37
- [**WAN 2004**]: Wang G., Strachan A., Cagin T., Goddard W., 2004. Calculating the peierls energy and peierls stress from atomistic simulations of screw dislocation dynamics: application to bcc tantalum Model. *Simul. Mater. Sci.* 12, S371–S389.
- [**WIN 1980**]: Wintenberger M., Renouard M., 1980. Homogeneous plastic-deformation of a single-crystal by glides of dislocations under given stresses and strains. *Comptes rendus hebdomadaires des séances de l’académie des sciences série B* Volume: 290 Issue: 16 Pages: 403-406.

CHAPITRE II - METHODOLOGIE EXPERIMENTALE ET APPLICATION AUX MONOCRISTAUX CU

L'ensemble des essais de ce travail a été réalisé sur des éprouvettes issues de monocristaux élaborés au laboratoire LSPM. Les méthodes d'élaboration sont brièvement résumées en première partie. Les monocristaux de ferrite ont été obtenus par la technique d'écrouissage critique et les monocristaux de cuivre par la technique de solidification dirigée (Bridgman). Le travail concerne essentiellement la ferrite, avec quelques essais sur le cuivre ayant servi de mise au point, de points de repères et de référence comparative entre le comportement expérimental d'une structure CFC et celui d'une structure CC. Le déroulement de la méthodologie de préparation expérimentale et d'acquisition des données présentera donc en premier lieu le cas du cuivre puis celui de la ferrite. Les résultats sur le cuivre présentés concernent quelques essais in situ MEB et in situ AFM selon le même protocole que celui appliqué ensuite à la ferrite.

II.1. Préparation des éprouvettes d'essais.

II.1.a. Elaboration des monocristaux.

- *Monocristaux de cuivre (solidification dirigée)*

La méthode de Bridgman est une technique qui permet d'obtenir des monocristaux et des multicristaux massifs, de grandes tailles selon leurs trois dimensions. La technique est maîtrisée de longue date au LSPM. La méthode Bridgman permet de réaliser des monocristaux de grandes dimensions (typiquement diamètre 5cms, hauteur entre 5 et 10cms) d'orientation contrôlée par solidification dirigée à partir d'un germe pré-orienté ou non. La technique consiste à déplacer un creuset contenant le matériau dans un gradient approprié de température. Le matériau à faire croître est d'abord mis dans un creuset approprié (graphite souvent et pour le cuivre notamment). Le creuset est ensuite chauffé avec un gradient de température vertical, de sorte que le métal soit en phase liquide dans le haut du creuset plutôt chaud, et soit sous forme solide dans le bas du creuset, plutôt froid. Le creuset est ensuite lentement tiré vers le bas, de la zone chaude vers la zone froide, afin de provoquer la cristallisation.

La maîtrise de cette technique de croissance nécessite de contrôler précisément le gradient de température et la vitesse de tirage, et de les adapter au métal à faire croître. Pour cela, il faut connaître la nature et l'importance des échanges d'énergie entre les différents éléments du système : le matériau en fusion, le cristal solidifié, le creuset, les éléments chauffants, les isolants thermiques, etc.

Les conditions utilisées pour le cuivre sont une vitesse de tirage dans le four de 1,67mm/h, une rotation du creuset de 6 tours/mn. Le pic du gradient de température traversé par le creuset est à la température de fusion du cuivre (1084°C).

On obtient en fin de traitement un multicristal à gros grains ou un monocristal de cuivre de forme cylindrique dans les dimensions du creuset utilisé dans lequel sont usinées plusieurs mini-éprouvettes de traction dont les dimensions dépendent du type d'essai, in situ MEB, in situ AFM voire conventionnel puisque les dimensions s'y prêtent.

La géométrie tridimensionnelle des monocristaux obtenus par solidification dirigée autorise a priori la sélection de toute orientation cristalline souhaitée, même lorsque le germe n'est pas pré-orienté. La pré-orientation du germe occasionne moins de perte de matière lorsque l'orientation souhaitée impose des découpes très inclinées dans un bloc résultant de croissance spontanée. Mais la relative facilité de croissance spontanée par rapport aux essais orientés qui peuvent être infructueux rend préférable le choix de cette première méthode.

Selon l'inclinaison de coupe, une section de cylindre procure des tranches allant de disques de diamètre 5cms environ (section transverse) et des quasis rectangles autour de 4x5 à 4x7 cm² environ (section axiale). Dans les 2 cas plusieurs éprouvettes sont disponibles pour les dimensions d'essais in situ et pour quelques essais conventionnels.

La solidification dirigée est une technique purificatrice puisque les impuretés se rassemblent au bas du cristal dans une zone impropre à l'usage.



Figure II.1. : *Four Bridgman (gauche) et monocristaux de cuivre (droite)*

○ *Monocristaux de ferrite (écrouissage critique)*

La méthode dite par écrouissage critique abouti en général à des monocristaux en produit plat ou en forme de barreau. La diversité d'orientations accessibles est de ce fait moindre que lorsqu'on détient des monocristaux massifs. La méthode est en général appliquée si la technique de fusion de zone est

empêchée par une ou plusieurs transitions de phases entre le l'état liquide et l'état solide à température ambiante. On résume ci-après la technique aboutissant à des produits plats telle qu'appliquée pour la ferrite commerciale étudiée, fer ARMCO brute de coulée dont la composition chimique est donnée au tableau II.1.

C	Mo	Si	P	S	Ti	Cr	Mn	Cu	Ni	Al	N	Va	Sn	Pb
0.0026	0.001	0.004	0.002	0.0047		0.016	0.080	0.009	0.011	0.002	0.006		0.002	

Tableau II.1 : Composition chimique du fer en %.

Les lopins initiaux sont préparés pour le laminage par usinage sous la forme présentée sur la **Figure II.2**. L'angle d'entrée dans le laminoir est de l'ordre de 35°.

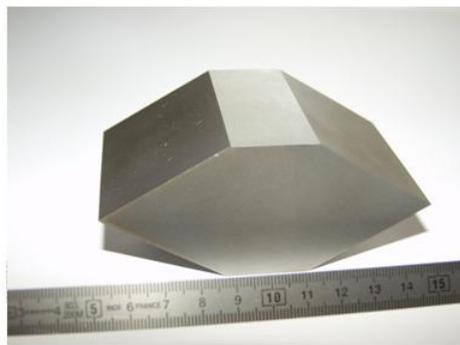


Figure II.2. : Lopins de ferrite commerciale

Cette forme est optimisée vis-à-vis de 2 objectifs :

1°) Eviter le « crocodiling » (**figure II.3**) auquel aboutit le laminage intense (plus de 50%) d'une lopin parallélépipédique, en raison des contraintes internes en tension qui s'installent dans le plan médian et qui conduisent à l'ouverture du lopin par ses extrémités.



Figure II.3. : Crocodiling en laminage intense de lopins de ferrite

L'élimination des contraintes dans les extrémités affinées et qui donc ne subissent plus de réduction donc de contraintes a été vérifiée à partir de quelques calculs par éléments finis réalisés au LSPM par Yann Charles (**figure II.4**). On peut obtenir de très longues lames réduites à 95% dans leur tiers

central et ne s'ouvrant plus. La contrepartie est que seul le tiers central de la lame obtenu est dans l'état requis pour les étapes ultérieures.

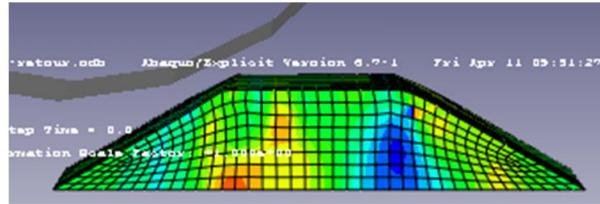


Figure II. 4 : Stress-free ends après laminage d'un lopin en pointe.

2°) faire en sorte que l'allongement de 2000% (facteur 20) qui résulte de la réduction de 95% (facteur 20) d'épaisseur reste de longueur manipulable (pas trop longue) et approprié pour les étapes ultérieures. Une zone « utile » centrale de 2 cms conduit à une longueur utile de lame de 40 cms. Les dix premiers centimètres de part et d'autre restent utilisés pour serrer l'éprouvette lors de l'étape de traction d'écroutissage critique. Elles doivent néanmoins être soigneusement supprimées pour l'étape de croissance en four vertical.

La dimension transverse des lopins est fixée par la largeur de passe du laminoir, une légère extension transverse étant constatée et devant être prise en compte (la dimension passe de 4cms à 5cms environ) mais ces bords hachurés sont supprimés avant le recuit suivant.

Après ces passes de laminage successifs (une cinquantaine environ, opérées manuellement, avec retournements avant/arrière et dessus/dessous du lopin entre chacune) jusqu'au taux de réduction du lopin de 95%, la lame de fer laminée obtenue est recuite 1 heure à 850°C sous vide secondaire. L'éprouvette est ensuite écourée par traction à température ambiante à une vitesse de déformation $\dot{\epsilon}=6,7.10^{-4}$ jusqu'à un allongement critique d'environ 3%. Nous sommes alors en fin du palier de contrainte correspondant à la propagation des bandes de Piobert-Lüders dans l'éprouvette.

La lame est ensuite placée dans un four vertical présentant un gradient thermique de 20°C/cm, avec une température maximale de 850°C et sous un vide secondaire de 10^{-5} mbar. Cette lame est déplacée suivant le gradient thermique à une vitesse de 7,5mm/h. Une croissance proprement dite dure donc environ 2 jours. Et l'ensemble de la procédure à partir de la découpe du lopin environ une semaine en temps cumulé.

On obtient en fin de traitement un multicristal à (très) gros grains ou dans les meilleurs cas un grand mono-cristal de fer plus ou moins épais dans lequel sont usinées plusieurs mini-éprouvettes de traction dont les dimensions dépendent du type d'essai, in situ MEB, in situ AFM ou conventionnel.

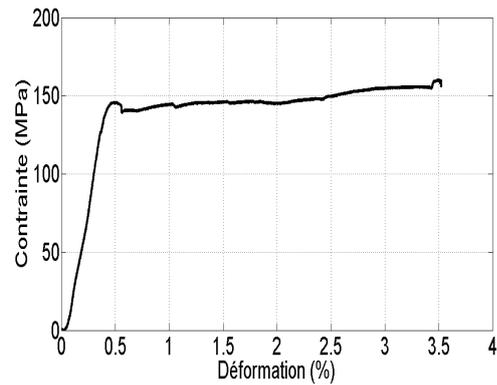


Figure II.5 : Essai de traction montrant une bande de Luders partie de la mordache haute et courbe de traction associée



Figure II.6. Un grand monocristal de fer alpha

Contrairement à la technique Bridgman de solidification dirigée massive, la méthode d'écrouissage critique à partir de laminage limite les orientations cristallines accessibles pour plusieurs raisons :

- La première résulte du fort taux de laminage appliquée aux lopins initiaux qui introduit une forte texture dans les lames qui vont ensuite être homogénéisées par recuit en taille de grains sans que les orientations soient redistribuées isotropiquement. Une texture de recristallisation est présente dans ces lames, elles participent d'ailleurs de la bonne propagation des bandes de Luders dans l'étape ultérieure, bandes que l'on observe dans les monocristaux dont l'orientation est proches de celles que l'on retrouve dans la texture de recristallisation d'après laminage (JAO 1967).
- La grande dimension des grains est généralement de type $\langle 110 \rangle$ tandis que le plan cristallographique préférentiel dans le plan de la lame est proche d'un plan (100) avec des écarts allant néanmoins de plus ou moins 20 degrés constatés en zone d'une direction $\langle 110 \rangle$. On accède donc le plus souvent aux orientations cristalline contenues dans un plan en zone d'une direction $\langle 011 \rangle$, mais sachant que les monocristaux ne font au maximum de 4 cms dans le sens travers, juste assez pour une éprouvette in situ, plus on doit tourner pour trouver l'axe souhaité plus il devient difficile d'obtenir une éprouvette.

Quelques grains minoritaires d'autres orientations arrivent néanmoins à subsister dans une plaque multicristalline. Réaliser une éprouvette d'essai in situ dont la zone utile est prise dans ce type de petits cristaux reste un exercice délicat.

- Une autre restriction de cette forme de monocristaux est la difficulté de réaliser des essais de compression, pour lesquels, in situ, une section de 3x3 cm² semble une limite inférieure difficile à atteindre.

Les efforts d'élaboration pour améliorer ces limites ont été menés dans deux directions :

- augmenter l'épaisseur des lames, ce qui nécessite de laminier des lopins toujours vingt fois plus épais que l'épaisseur de lame finale visée : 2cms pour 1mm, 4cms pour 2mm, 6cms pour 3mm etc. Cette augmentation en hauteur étant associée à un maintien d'une zone utile autour de 2 cms (les parties latérales de matière perdue augmentent) rend difficile l'accès à de telles épaisseurs. Nous avons cependant réalisé des essais jusqu'à 3,5 mm d'épaisseur finale (lopins de 7 cms de haut), avec l'obtention de quelques gros cristaux ce qui a rendu possible la réalisation originale de quelques essais de compression. Comme on pouvait s'y attendre, une épaisseur augmentée contrarie la cinétique de croissance des grains et les grands monocristaux deviennent plus difficiles à obtenir au-delà de 2 mm d'épaisseur ;

- élaborer des monocristaux par écrouissage critique après extrusion dont quelques articles anciens font état de la faisabilité sans préciser toutes les conditions (**KAD 1967, LUB 1979**)² : en mettant à profit les équipements disponibles au LSPM, quelques tentatives ont été menées dans ce sens, mais insuffisantes tant les paramètres de la croissance cristalline à re-explorer sont nombreux, notamment le taux de réduction et la vitesse, informations clés non renseignées dans les articles trouvés faisant état de quelques succès. Les barreaux de diamètre 6 mms obtenus révèlent quelques grains de 6 ou 7 mm, hauteur suffisante, mais qui sont bien loin d'occuper toute la section du barreau ni même d'avoir une section qui permettrait un essai de compression. Ces quelques essais sont néanmoins prometteurs si une campagne poussée s'en donnait l'objectif.



Figure II.7 : Croissance de grains après extrusion (P. Langlois, LSPM)

² Kadeckova S., Sestak B., 1967. Growth of high purity iron single crystals. *Kristall und technik*, **2** (2), 191-203.
Lubitz K., Goltz C., 1979. The preparation of large spherical iron single crystals. *Applied Physics*, **19**, 237-239.

Finalement, les essais de compression réalisés ont utilisé des grains de plaques d'épaisseur de 3 mm porteuses de grains assez gros et assez diversifiés en orientation pour réaliser les petites éprouvettes de compression in situ. Ces éprouvettes, obtenues après maints essais infructueux, se sont avérées aussi très difficiles de préparation ultérieure (découpe, polissage, installation dans la micro-machine). Bien que ces difficultés aient fortement limité les essais de compression réalisés, la campagne menée constitue une originalité de ce travail et nous avons finalement réussi à examiner plusieurs des cas d'orientation les plus intéressants.

II.1.b. Sélection des orientations d'essais.

Cette étape relève avant tout de l'objectif visé en termes de tentative d'activation de systèmes de glissement. Le choix des orientations d'essais suppose toujours que le critère de Schmid d'activation préférentiel des systèmes de plus grand facteur de Schmid s'applique. Si les observations le contredisent, il s'agit en soi d'informations a contrario.

○ *Monocristaux de cuivre*

S'agissant de quelques essais de référence sur un matériau et dans des conditions où le critère de Schmid est bien connu s'appliquer, et pour lequel les systèmes de glissement sont d'une seule et même famille, le choix consiste à prendre une éprouvette en milieu du triangle de référence, de telle sorte que l'on puisse obtenir un stade initial de glissement simple et que l'on puisse déformer l'éprouvette jusqu'au stade de glissement double. Il n'est donc pas très compliqué d'obtenir une telle orientation, dans des monocristaux qui sont de gros cylindres de 5 cms de diamètre et autant de hauteur. Nous n'avons réalisé sur Cu que quelques essais de calage.

○ *Monocristaux de ferrite*

La possible co-existence de deux familles de plans de glissement dont l'une possiblement asymétrique, impose d'examiner au moins 3 situations spécifiques en plaçant pour chacune d'elle dans la zone d'orientation du triangle de référence où le facteur de Schmid sera maximum pour l'une de ces 3 situations : soit sur un système $\langle 111 \rangle (110)$, soit sur un système $\langle 111 \rangle (112)$ en sens facile, soit sur un système $\langle 111 \rangle (112)$ en sens difficile. La reproductibilité des essais imposant au moins de répéter chaque situation retenue au moins une fois, la plupart des essais ont été dédoublés, soit sur une même orientation si la dimension du cristal permettait la découpe de plusieurs éprouvettes identiques, soit sur une orientation voisine. Dans le second cas, le plan de grande face du cristal n'était pas forcément le même. Plusieurs cristaux de plusieurs multicristaux ont finalement été utilisés au total, avec nécessairement certaines variabilités supplémentaires de l'un à l'autre. En

plus des situations où le glissement est attendu se produire selon une seule direction, plusieurs orientations de glissement symétrique potentiel ont aussi été tentées avec succès.

L'objectif d'un minimum de 3 paires d'orientations pour chacune des situations de glissement monodirectionnel envisagées (in situ MEB et in situ AFM) conduisait à devoir préparer au moins une douzaine d'essais de traction, avec quelques essais conventionnels de recalage et comparaison, dans l'éventualité d'effets de taille vis-à-vis de certaines étapes de préparation et autant d'essais de compression in situ MEB. Les orientations de symétrie visées, différentes en traction et en compression, ont ajouté une autre demi-douzaine d'essais à cet ensemble. Il fut assez difficile de réaliser de manière satisfaisante les essais de compression envisagés mais nous avons finalement réussi l'essentiel d'entre eux au moins une fois et avec des résultats fiables.

La technique d'érouissage critique post laminage a donc permis d'obtenir assez de cristaux bien orientés pour accéder aux 3 zones principales où les trois types de systèmes étaient susceptibles d'être activés, en glissement mono ou multi directionnel, lors d'essais de traction et de compression.

Les orientations étudiées sont représentées sur la Figure II.9 où sont indiquées qualitativement les zones d'activation des différents types de plans. Les frontières entre ces zones sont de positions hautement variables, comme décrit au **chapitre I**. Cette figure indique également les directions de rotation cristalline escomptées pour chacune des orientations, en traction et en compression.

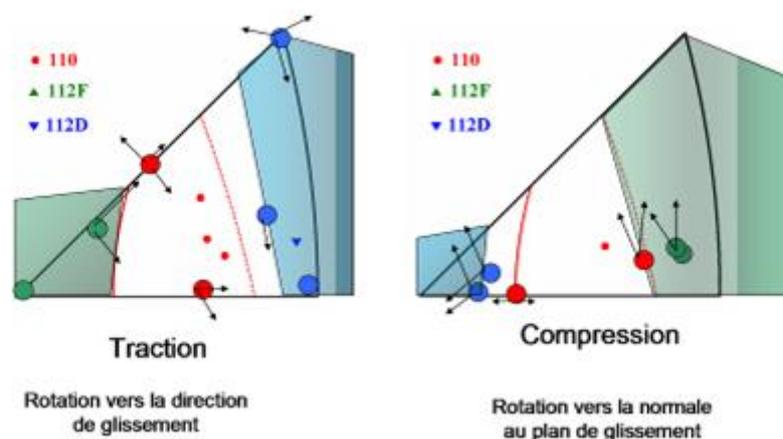


Figure II.8. Les orientations cristallines étudiées de monocristaux de fer alpha en traction (gauche) et en compression (droite).

II.1.c. Préparation des éprouvettes.

○ *Orientation par méthode Laue des grands cristaux*

La procédure d'identification des monocristaux ayant poussé est le préalable au choix des orientations tests, puisque ces orientations ne sont pas prédéterminées. La réalisation de clichés

Laué sur de longues éprouvettes ou sur des blocs de cuivre massif, nécessite un montage exempt de toute dérive du faisceau durant la durée de la pause, qui est de l'ordre de 10 minutes.

La longueur des cristaux individuels nécessite en général au moins 2 clichés Laué éloignés pour contrôler la qualité cristalline. Pour des cristaux de plus de 10 cms, un cliché central supplémentaire est réalisé. Dans une lame de 4 cms de large, il est fréquemment obtenu 2 cristaux différents dans le sens travers, et dans la plupart des lames 2, 3 ou 4 grains ont pu être exploités. Les éprouvettes de compression ont été réalisées dans de petits grains traversant dans les plaques les plus épaisses.

○ *Découpe par electro-erosion*

La découpe par électro-érosion a été effectuée au LSPM sur une machine Robofil. On utilise un fil de laiton de 0.25mm de diamètre qui défile à 8m/mn en bain d'eau dé-ionnisée. La tension mécanique du fil est réglée à 1.20 dN.

La découpe par électro-érosion introduit un écrouissage de surface de l'ordre du rayon du fil de découpe, dont le polissage ultérieur doit en principe supprimer l'épaisseur concernée. Dans le cas de très petites sections d'éprouvettes, la manipulation de polissage rend difficile la suppression de cette couche écrouie, notamment sur les bords latéraux des éprouvettes. Les quelques essais réalisés sur des éprouvettes conventionnelles sur d'assez grands cristaux ont montré que la limite élastique était augmentée d'environ 15% sur les tractions in situ.

Il convient également de souligner que la densité initiale de dislocations dans les monocristaux de Fer alpha comme de cuivre de notre étude était plutôt de l'ordre de 10^{13} à $10^{14} m^{-2}$, quantité ayant mérité un recuit d'homogénéisation après découpe pour revenir à un niveau plus faible. Or un tel recuit n'était pas envisageable toujours en raison des faibles sections d'éprouvette des essais in-situ, le risque étant grand d'une recristallisation invasive détruisant la monocristallinité des éprouvettes découpées.



Figure II. 9 : Exemple de monocristal de Cu et les découpes d'éprouvettes de traction



Figure II. 10 : Exemple de plaque multicristalline de fer et les découpes d'éprouvettes de traction

○ **Polissage des monocristaux de cuivre**

La méthode de préparation des éprouvettes de cuivre découpées consiste en un polissage mécanique sur papier abrasif jusqu'à taille de grain 5 μm puis enfin un polissage électrolytique à l'aide d'un électrolyte D2 associant acide phosphorique (15-35 %), éthanol (15-25 %), propane-1-ol (10%), urée (1%) et de l'eau (50-70%).

○ **Polissage des monocristaux de ferrite**

L'éprouvette à subir un polissage mécanique au papier abrasif puis à la pâte diamantée, enfin un polissage électrolytique à l'aide d'une mélange de solution A2-I et A2-II donc les composants chimique sont : A2-I éthanol (65-85%), 2-butoxyéthanol (10-15%) et de l'eau (5-15%) ; A2-II acide perchlorique 60%.

○ **Formes des éprouvettes selon essais**

La figure II.11 montre la géométrie type des essais in situ en traction et en compression. En traction, l'exemple reporté est celui de la géométrie des éprouvettes de la miro-machine du MEB. La forme est légèrement différente pour les essais in-situ AFM en raison des différences de caractéristiques des micro-machines sur les 2 microscopes. Dans les 2 cas la section utile est de l'ordre de $2 \times 2 \text{mm}^2$ (la largeur est fixée mais l'épaisseur peut varier). La longueur utile est de 11mm. La géométrie des éprouvettes de compression est un simple parallélépipède de section $3 \times 3 \text{mm}^2$ et hauteur 5mm.

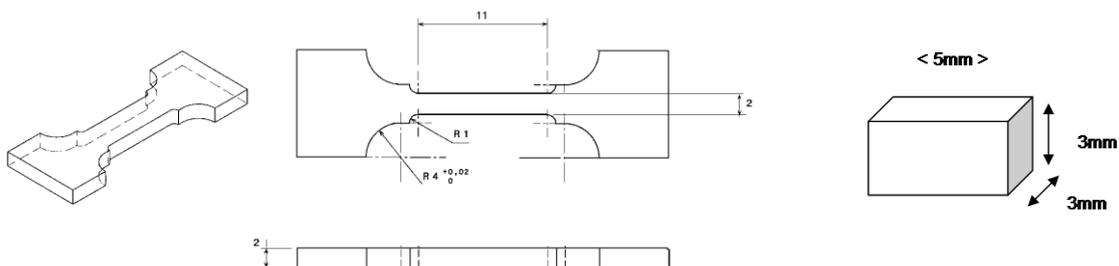


Figure II.11 : Eprouvettes type d'essai in situ, en traction (gauche) et compression (droite)

Précisons enfin que dans le cas des observations AFM pour analyse d'images, la rugosité R_r de la surface de l'éprouvette (hauteur maximum sur l'étendu de l'aire de mesure) est inférieure à $R_r = 2\mu m$.

II.2. Protocole des essais in situ MEB.

II.2.a. Description du dispositif.

Le microscope utilisé pour les essais in situ (Jeol 360) est illustré **figure II.12** avec la mini-machine d'essais de traction et le montage de compression qui s'insère dedans.

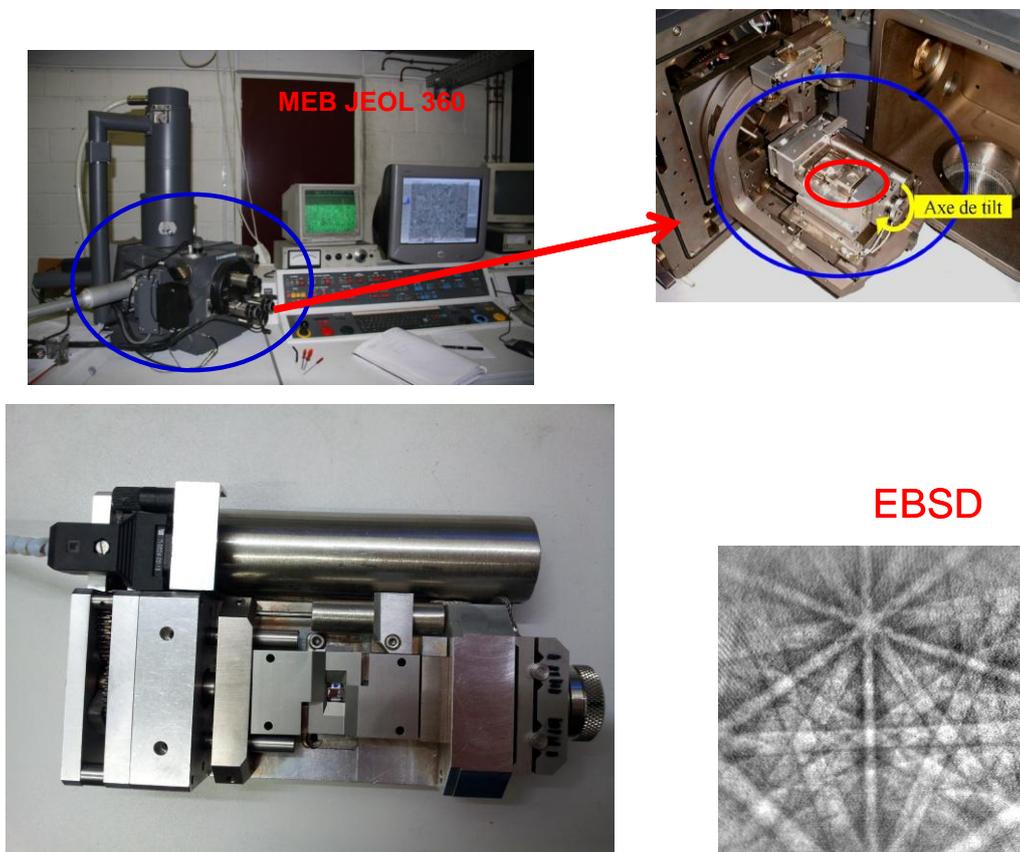


Figure II. 12 : Machine de traction in situ MEB et montage de compression

Les essais sont menés de telle sorte qu'en plus de la courbe contrainte-déformation il soit possible d'acquérir au long de l'essai des micrographies de la surface montrant les traces de glissement actif et d'acquérir par méthode EBSD (electron back scattering diffraction) l'orientation cristalline instantanée correspondant à la déformation atteinte.

II.2.b. Un essai type sur Cu.

La **figure II.13** montre les caractéristiques d'un essai de traction in-situ avec vitesse de traction $10^{-4} s^{-1}$. L'axe de traction initial est proche de la direction (21 4 2), et la normale de la surface proche de (-6 24 15). Les lignes de glissement sur la surface coïncident avec les lignes théoriques, donc les images MEB nous confirment l'activation du système de glissement primaire $\langle 101 \rangle [-1-11]$ et montre l'activation secondaire du système $\langle 110 \rangle [1-11]$.

Pendant le glissement simple primaire, l'axe de traction tourne vers direction du glissement $\langle 101 \rangle$. Dès que la rotation traverse la zone $\langle 1 0 0 \rangle - \langle 1 1 1 \rangle$ on active le système de glissement secondaire $\langle 1 1 0 \rangle [1 -1 1]$. Dans la suite de l'essai l'axe de traction va rester stable sur la ligne $\langle 100 \rangle - \langle 111 \rangle$ jusqu'à la fin du test.

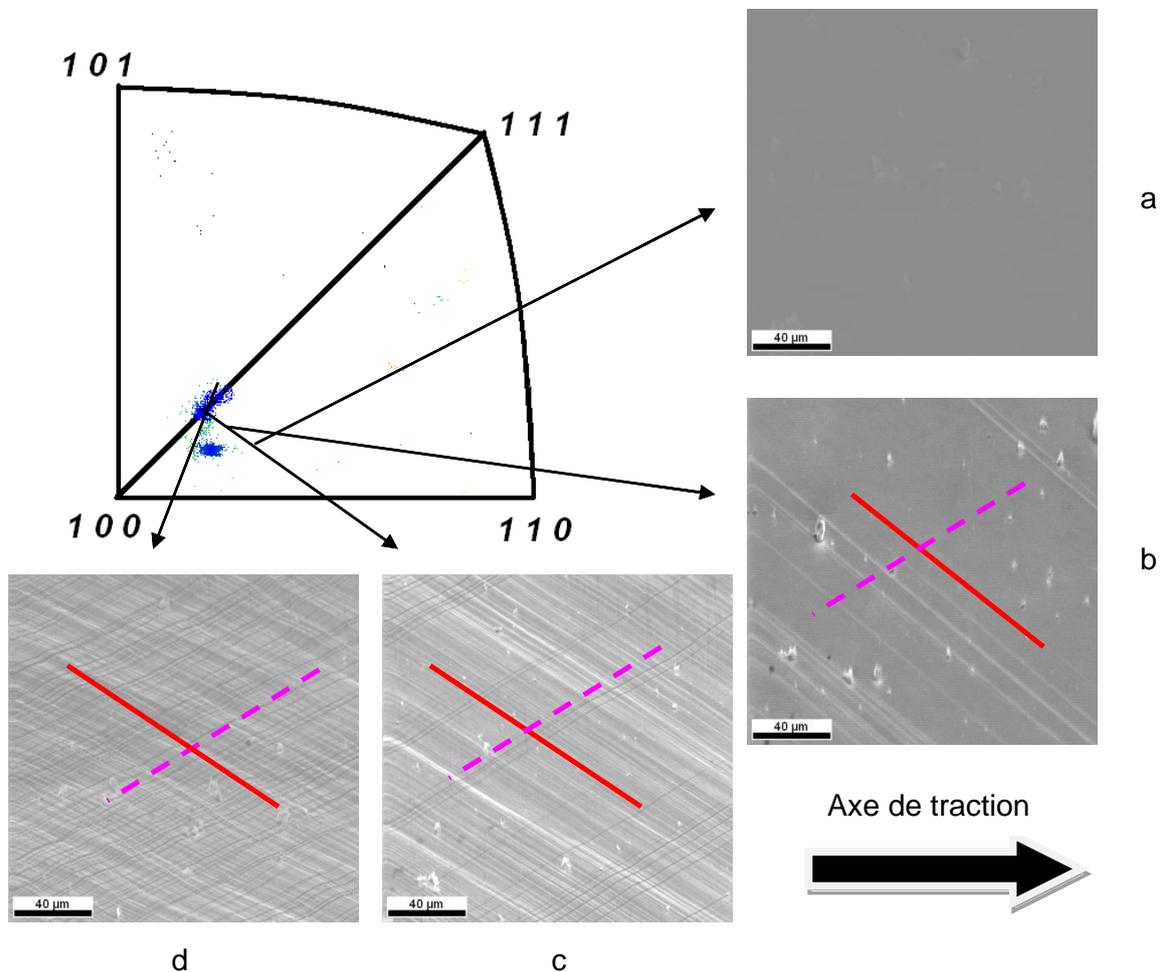


Figure II. 13 : En rouge le système de glissement primaire $\langle 1 0 1 \rangle [-1 -1 1]$ et en mauve le système secondaire $\langle 1 1 0 \rangle [1 -1 1]$. Facteurs de Schmid initiaux $R1/R2 = 0.4685 / 0.4206$. Facteur de visibilité de système de glissement principal $k=0.22$, et secondaire $k=0.44$. Micrographies a, b, c et d à respectivement 0%, 3%, 10% et 35% de déformation.

La courbe contrainte-déformation reportée sur la **figure II.14** montre une limite d'élasticité élevée et une absence de **stade I** marqué, ce qui provient à la fois de la densité initiale de dislocations (estimée à $10^{14} m^{-2}$ à partir de l'analyse de pics de diffractions au LSPM par T. Chauveau) et de la petite section d'éprouvette sur laquelle la découpe par electro-érosion (sur 4 faces) a déposé un écrouissage supplémentaire.

L'effet de la découpe par electro-érosion est moindre pour les éprouvettes de fer issues de lames planes puisque seules 2 des 4 cotés de section sont affectés.

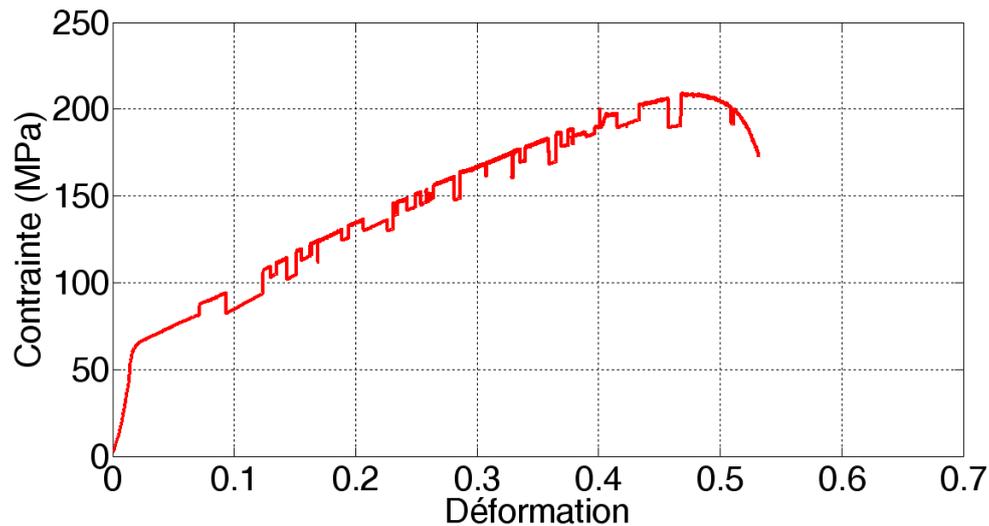


Figure II. 14 : Courbe contrainte-déformation pour l'essai in situ sur Cu de la figure II.13.

II.3. Protocole des essais in situ AFM.

II.3.a. Description du dispositif.



AFM Dimension 3100 – Nanoscope 3 Veeco

Figure II. 15 : Microscopie à force atomique et machine de traction in situ

La machine montrée sur la **figure II.15** est sensiblement de même taille que la machine in situ MEB mais la cellule de force est limitée à 300 N contre 9000 N pour celle du MEB. Le dispositif de l'observation en champ proche ne permet pas les essais de compression sur le principe de traction renversée utilisée dans le MEB. Les essais en AFM ont pour objectif d'examiner les caractéristiques de planéité du glissement cristallographique et la manière dont ce glissement débouche en surface, son hétérogénéité de répartition et l'évolution de celle-ci en déformation.

II.3.c. Un essai type sur Cu.

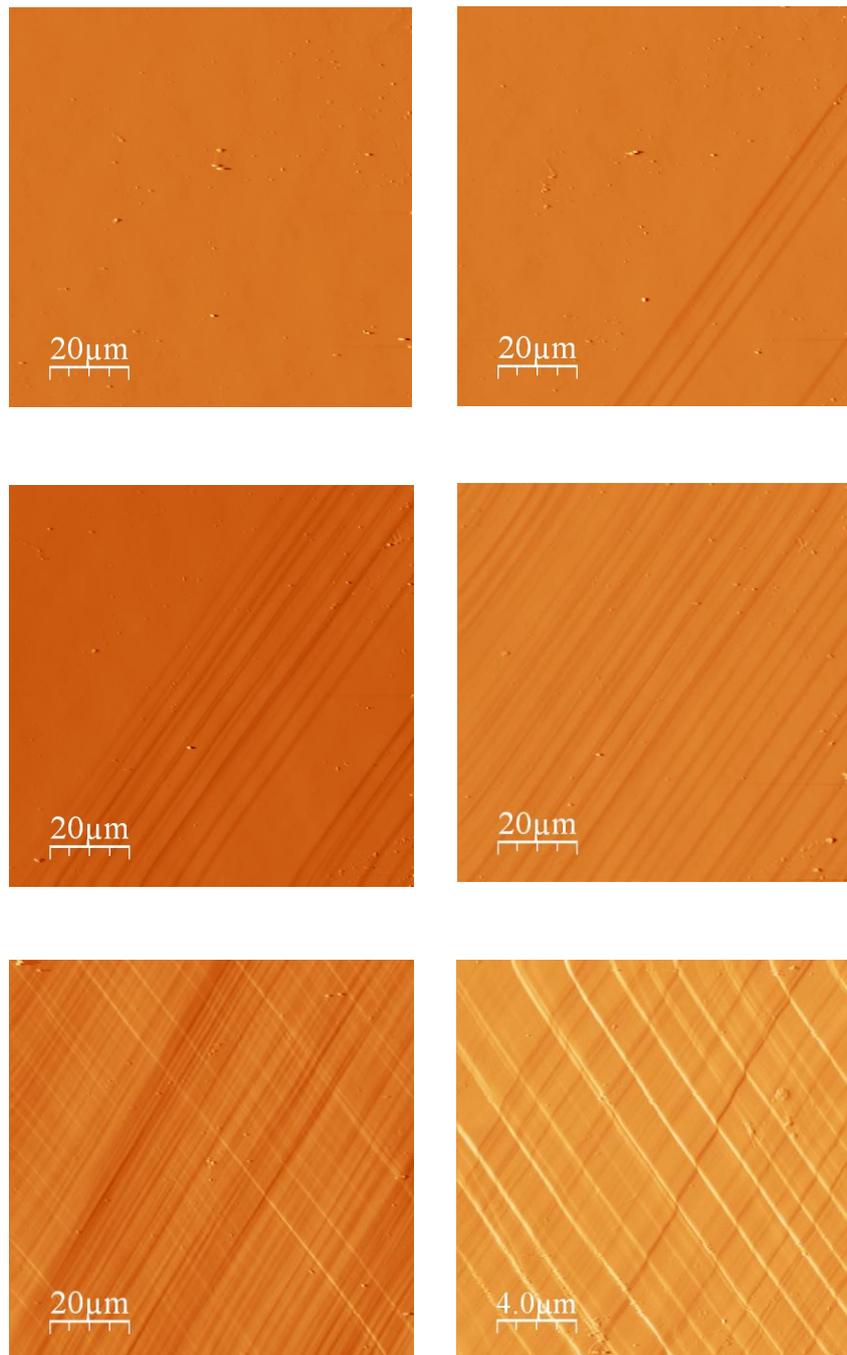


Figure II. 16 : Séquence d'images de glissement à partir d'un essai de traction sur Cu

La **figure II.16** reporte une série de 6 images obtenues lors d'une traction en AFM sur l'éprouvette de cuivre précédente, à des déformations typiquement de 0%, 3%, 6%, 10%, 20% et 30% (prises dans une séquence plus longue d'une trentaine d'images) qui montrent que bien que la courbe de traction n'ait pas montré de stade de glissement simple il y a initialement un plan largement prédominant correspondant au plan primaire, répartie de manière plus ou moins homogène au début puis envahissant progressivement toute la zone d'observation. Le système secondaire s'y superpose de manière plus ou moins homogène lorsque la rotation a été suffisante pour permettre son activation.

Une telle série d'images AFM montre que :

S'agissant d'un glissement connu pour être plan, les lignes de glissement sont très droites et les légères sinuosités observables sont plutôt à mettre au compte des rugosités de surface et des fronts de glissement sur les plans débouchant. On note clairement que même si deux lignes sont très proches, elles restent toujours parallèles, leurs sinuosités étant identiques.

L'observation de la série entière montre également que les lignes de glissement primaire émergent en en salves, en paquets et que si les lignes ont tendance à progressivement remplir la surface, l'intensité d'une ligne à l'autre peut fortement varier. On note enfin sur les photos rapportées que les lignes du système secondaire n'émergent pas aussi intensément là où les lignes primaires sont intenses que là où elles sont plus fines, et que si les traces primaires sont visiblement hachées par les traces secondaires (dernière photo), le contraire n'est pas vrai, ce qui tend à indiquer une non simultanée des 2 systèmes mais plutôt leur succession. La **figure II.17** montre une vue 3D de ce même glissement double en fin d'essai, ou la planéité du système secondaire venant sectionner les traces primaires apparaît très clairement.

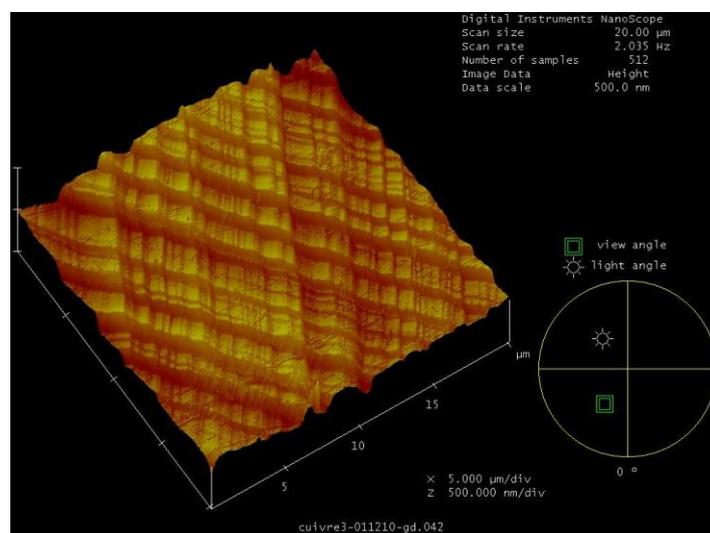


Figure II. 17: Glissement double en essai de traction sur Cu

Ces observations micrographiques nous procurent une référence pour la question de déterminer le caractère planaire ou non planaire d'un glissement cristallographique, en identifiant la présence ou non de glissement(s) dévié(s).

Le **chapitre V** rapporte une analyse quantitative de glissement simple sur plan (110) dans le fer alpha à partir d'une séquence plus complète d'images.

CHAPITRE III – ECARTS A LA LOI DE SCHMID DANS LES CRISTAUX CC

Ce chapitre concerne l'analyse de différentes raisons inhérentes à la structure CC susceptibles d'être interprétées comme des écarts, des déviations ou même des violations de cette loi selon la manière dont elle est comprise. Si on considère que cette loi fut d'abord introduite pour le glissement basal dans les cristaux hexagonaux on peut comprendre que sa formulation originelle n'ait pas reçu la formulation la plus générale possible en accord avec son sens fondamental. Cette analyse a fait l'objet d'un article soumis à publication dans Philosophical Magazine et en cours d'évaluation. Cet article, écrit en langue anglaise, est entièrement reproduit ici après qu'un résumé en français en soit présenté. Dans un souci d'harmonisation de la présentation de ce mémoire de thèse, la numérotation des chapitres est reprise en conformité avec les autres chapitres, les figures et tableaux sont réinsérés dans le corps du texte avec leurs légendes et les références sont placées en dernière section.

EXPECTABLE SPECIFIC FEATURES OF BCC CRYSTAL PLASTIC FLOW AND CONSISTENCY WITH THE SCHMID LAW

L.T. Le, P. Franciosi *

LSPM UPR 3407 CNRS, University of Paris13, 93430 Villetaneuse, France

A paraître dans Philosophical Magazine, 2013

- Résumé en français pour le présent mémoire -

La loi de Schmid telle que formulée dans les années 1930 stipule que dans des monocristaux bien homogénéisés par recuit, la déformation plastique s'initie par glissement sur le ou les système(s) sur lesquels la cission résolue atteint une valeur critique qui est la même sur tous les systèmes. Interprétée en association avec la loi d'écrouissage par la forêt d'obstacles qui relie la cission critique d'écoulement plastique à la racine carrée de la somme pondérée des densités de dislocations de chaque système de glissement, la loi de Schmid dans sa formulation d'origine équivaut à dire que les densités de dislocation initialement disponibles sur chaque système sont égales.

Mais ces deux propositions ne sont équivalentes que tant que tous les systèmes de glissement sont d'une même famille, d'un même type plan-direction comme c'est le cas pour le glissement basal des cristaux hexagonaux et le glissement octaédrique des cristaux CFC. Autrement, si l'observation de Schmid est due à ce que les densités de dislocations mobilisables sur chaque système de glissement potentiel sont identiques initialement il n'en résulte pas nécessairement des cissions critiques

* Corresponding author patrick.franciosi@univ-paris13.fr

identiques sur des systèmes de types plan-direction qui seraient différents. De plus, ce critère d'écoulement ne vaut que pour des systèmes de glissement géométriquement symétriques vis-à-vis du mouvement des dislocations. Sinon, à densité de dislocations commune, la cission critique d'activation d'un système ne sera pas nécessairement la même selon le sens que le glissement prend sur le plan de ce système, c'est-à-dire selon le signe de la cission résolue sur celui-ci.

Ces remarques de base impliquent que pour la plupart des structures cristalline dont les systèmes (plan dense – direction dense) ne constituent pas les seuls systèmes de glissement activables, ou bien celles qui impliqueraient des systèmes non symétriques vis-à-vis du glissement, la compréhension de la loi de Schmid doit être élargie de manière appropriée, sans que cela conduise pour autant à parler d'écarts, de déviations et a fortiori de violations.

La structure CC figure au premier rang de celles qui à la fois impliquent plusieurs types de systèmes de glissement et associe des types symétriques et des types asymétriques géométriquement, ces derniers étant donc susceptibles de ne pas avoir un même seuil critique selon le sens du glissement.

On notera que la structure hexagonale implique également souvent plusieurs familles de systèmes de glissement, dont seuls les systèmes basaux sont symétriques, et on notera que au-delà des structures cubiques, il n'existe quasiment plus de systèmes symétriques y compris pour les systèmes principaux.

L'application élargie de la loi de Schmid initiale à des situations qui n'avaient pas été concernées dans les premières études nécessite donc qu'à tout le moins ces fluctuations ou variabilités attendues, prévisibles, soient prises en compte avant d'évoquer de réels écarts, déviations et voire des violations.

L'article théorique qui constitue ce chapitre s'est efforcé de montrer quels types de variabilités il était possible de prévoir en prenant comme première hypothèse la participation des systèmes de plans (112) au mouvement des dislocations et donc à la déformation par glissement et en supposant que ces systèmes puissent être symétriques, ce que plusieurs travaux ont déjà notés au long du 20^{ème} siècle sans que pour autant cette éventualité ait été consacrée ou infirmée par les divers calculs menés en DM ou en DD depuis les années 1990.

Parmi les possibles sources d'une telle symétrie, la discussion menée amène à explorer 2 causes principales. La première est associée à la matrice d'interaction entre paires de systèmes de glissement, c'est-à-dire entre paires de dislocations appartenant à deux systèmes, telle que cette matrice apparaît dans la loi d'écrouissage forêt. Si des systèmes sont asymétriques, avec un sens facile F et un sens difficile D , chaque coefficient d'interaction entre 2 tels systèmes peut se voir dupliquer en 3 ($F-F$, $F-D=D-F$, $D-D$) termes, une seule de ces possibilités n'étant à prendre en compte pour chaque paire pour une orientation et un signe donnés de sollicitation. Pour une paire mixte (plan symétrique S et plan asymétrique F/D), l'alternative est entre $S-F$ et $S-D$. Le nombre

d'options par paires multiplié par le nombre possible de paires géométriquement différentes (une petite vingtaine) suffit à rendre la matrice globale extrêmement versatile selon la sollicitation. L'analyse menée montre que cette simple hypothèse, indépendamment de la manière dont les coefficients « effectifs » se modifient, n'induit pas de la variabilité dans les cissions critiques qu'entre systèmes de types différents : il apparaît également des différences au sein d'une même famille de systèmes, ces différences changeant constamment selon l'orientation et signe de sollicitation, ce qui se manifesterait également au cours d'un chargement durant lequel un cristal tourne, c'est-à-dire le plus souvent.

La seconde cause examinée est associée à la multiplicité élevée des systèmes de glissement colinéaire dans la structure CC : alors que le glissement basal n'a pas de système colinéaire dans les cristaux hexagonaux et que les cristaux CFC n'ont qu'un système colinéaire pour chaque système de glissement, les cristaux CC en ont au moins 2 par système en ne considérant que les seuls plans denses (110) et en ont 5 par système si l'on considère les plans (110) et (112) ensemble. La manière dont le glissement colinéaire influence l'évolution des cissions critiques a été étudiée en DD pour les cristaux CFC. Pour chaque système de glissement, des termes supplémentaires apparaissent montrant des contributions de glissement dévié à côté du glissement propre du système en proportion des cissions résolues sur l'un et l'autre, la cission résolue sur le système propre étant toujours supérieure à celle sur le système dévié associé. Avec un angle de 71° (ou 109°) entre deux plans colinéaires (111) de la structure CFC, la cission résolue sur le système dévié d'un système principal actif reste le plus souvent faible ce qui n'apporte en général qu'une faible contribution de glissement dévié. Il n'en va pas de même dans la structure CC, dans laquelle les 6 plans en zone d'une même direction $\langle 111 \rangle$ ne sont qu'à 30° les uns des autres. Il y a donc toujours plusieurs systèmes déviés non négligeables associés à tout système principal, typiquement 4 plans qui sont positionnés 2 par 2 de part et d'autre de ce dernier.

Le rôle de ces glissements déviés apparaît également comme une possible raison alternative d'asymétrie de comportement selon le sens de glissement sur un système, car toujours dans l'hypothèse d'un comportement non symétrique des plans (112) selon le signe de la cission résolue sur eux, le glissement dévié peut s'avérer plus ou moins facile.

L'ensemble des possibilités de déviation, de (110) ou (112)F ou (112)D vers (110) ou (112)F ou (112)D comparé à l'unique type de déviation en structure CFC conduit à remplacer le paramètre scalaire unique qui suffisait à représenter ce dernier par une matrice nouvelle de coefficients de dimension 3×3 .

Enfin, compte tenu de la grande quantité de travaux faisant état de possibles effets des contraintes autres que la cission résolue sur un système donné pour y déplacer les dislocations, et en relation à la symétrie ternaire de la structure de cœur des dislocations dans les cristaux CC, nous avons

examiné la possibilité de prendre en compte dans le critère d'écoulement plastique de possibles couplages entre les systèmes, et en premier lieu entre systèmes colinéaires en restant aussi près que possible du critère de Schmid.

Nous avons pour cela utilisé la loi de Schmid sous la forme régularisée proposée séparément par Gambin 1991 et Arminjon 1991, qui à l'origine visait de fait à introduire de l'interaction entre les systèmes de glissement là où la loi de Schmid les traite comme étant strictement indépendants.

En relation à la multiplicité de glissement dévié précédemment souligné, une interdépendance des systèmes colinéaires est le couplage primordial qu'il nous a semblé important de considérer.

En comparant avec quelques données expérimentales type du comportement des cristaux CC prises dans la littérature les diverses fluctuations à la loi de Schmid que ces différentes caractéristiques entraînent, nous avons montré qualitativement que les « écarts » rapportés pouvaient en large part trouver explication compatible avec le cadre de la loi de Schmid dans la compréhension plus ouverte que nous en faisons.

Enfin, à propos d'une soi-disant violation se manifestant pour des métaux réfractaires de haute température de fusion comme le molybdène, le tantale le niobium etc, dans certaines conditions de haute pureté et dans certains régimes de température et/ou de vitesse, nous montrons que cette violation trouve aussi conformité au cadre de la loi de Schmid si l'on attribue à l'interaction entre 2 systèmes non colinéaire de plans (112) et de directions $\langle 111 \rangle$ à 71° , une valeur élevée, via la formation de jonctions « dures » à franchir mais aisées à éviter en mobilisant un système colinéaire malgré un facteur de Schmid faible.

Cette « anomalie » n'est jamais rencontrée dans le fer alpha étudié dans ce travail.

On verra néanmoins que certains des résultats rapportés au chapitre IV vont dans le sens d'une forte interaction entre directions de glissement à 71° , ce qui tel que rapporté au chapitre I, correspond à une recombinaison défavorable énergétiquement des 2 familles de dislocations interagissant. On peut donc concevoir que si cette interaction devient « trop » forte, un comportement particulier, un mécanisme spécial, se produise mais sans qu'il viole la loi de Schmid à strictement parler.

Remarque : cette partie du travail a été motivée par les difficultés rencontrées à dégager clairement dans nos résultats de limite élastique une hiérarchie entre les cissions critiques des différents types de systèmes. Les variabilités examinées ici montrent bien que les difficultés rencontrées, que l'on retrouve également dans les études les plus complètes rapportées dans la littérature (Jaoul et Gonzales 1961, Takeuchi et al, 1967), ne proviennent pas uniquement d'incertitudes sur les essais menés mais aussi et peut-être d'abord des causes intrinsèques pointées.

EXPECTABLE SPECIFIC FEATURES OF BCC CRYSTAL PLASTIC FLOW AND CONSISTENCY WITH THE SCHMID LAW

L.T. Le, P. Franciosi*

LSPM UPR 3407 CNRS, University of Paris13, 93430 Villetaneuse, France

Philosophical Magazine DOI:10.1080/14786435.2013.816449

Abstract: when several types of slip systems participate to crystal plasticity, the critical shear stress (CSS) of each system can suffer load orientation and sign dependencies. Variations on the CSSs can result from asymmetric slip planes contributing to the plastic straining, as is the case for $\{112\}$ planes in BCC crystals, and from collaboratively involved slip planes in multi-planar dislocation motion. For BCC crystals these planes are the in-zone, cross-slip, planes of each $\langle 111 \rangle$ slip direction. Strictly speaking, these expectable variations do not constitute a violation of the Schmid law and not even a deviation. In order to further account for crossed non glide stress effects between slip planes, existing regularized forms of the classical Schmid law which do not either violate the fundamentals of the criterion, seem adaptable for matching with typical experimental data of both BCC and FCC structures. This is discussed and exemplified here.

Keywords: *Crystal plasticity, plastic flow criterion, FCC, BCC, asymmetric slip, non Schmid law.*

1. Introduction.

The efficiency of the Schmid plastic flow criterion for FCC metal crystals plastically deformed by slip on $\{111\}$ planes [1] is now widely admitted to be more an exceptionally simple situation than a general rule applying to all crystalline structures. In the case of BCC metals, several discrepancies or disagreements with the Schmid law have been pointed from experimental observations since the early works in the thirties in which the plastic flow was observed to follow the plane(s) of maximum shear stress [2-11]. These observed “deviations” since then go from expected different threshold stresses in cases of different families of slip planes to more questioning “non glide stress” effects [12,13] possibly responsible for strongly “anomalous” behaviour observed for several metals in particular temperature or strain rate ranges [14,16]. So far, these various pointed abnormal features with regard to the Schmid law do not find a satisfying alternative framework to explain all of them at once. And this, despite of the tremendous progresses in numerical simulations at the molecular

* Corresponding author patrick.franciosi@univ-paris13.fr

and discrete dislocation scales during the last twenty years which have clarified many key features of slip in BCC crystals:

- The since long debated participation to slip of non dense plane types together with or instead of the $\{110\}$ dense planes, all in-zone of the well established $\langle 111 \rangle$ slip directions, seems now well admitted to restrict to $\{112\}$ planes in most of the circumstances;
- The frequently observed not planar and wavy slip traces are understood as due “somehow” to the motion of dominantly screw dislocations having a not-planar core structure [17-21].
- Owing to the lattice ternary symmetry around the $\langle 111 \rangle$ directions and to the multiplicity of available collinear systems, the underlying mechanisms of this slip waviness are very different from those of FCC crystals which mainly concern recovery stages [22,23].
- The global motion of these dislocations which has been examined in details for the different temperature regimes [10-16] basically involve a repeated process of kink pair creation and motion (not to be addressed here).

Yet, still highly controversial remains which are the elementary steps of the dislocation motion, either on the $\{112\}$ and/or on the $\{110\}$ planes. Also, while the many kinks or jogs carried by the dominantly screw dislocations are often thought to play a key role in the transition from simple “deviations” from the Schmid law to more “anomalous” behaviour [15] of certain metals under certain conditions, “normal” explanations are also given within the Schmid law frame that activation of weakly stressed systems results from particularly strong hardening interactions [14].

We here aim at pointing that, owing to the slip characteristics of BCC crystals, the Schmid law can naturally suffer a quite large variability in terms of load orientation and sign dependency of the critical shear stresses (CSSs) of the slip systems, without this variability being constitutive of a violation of the law and perhaps not even a deviation from it. We first present (section 2) how a possible asymmetry of the individual $\{112\}$ slip planes and a highly collinear collective slip involving $\{110\}$ and $\{112\}$ in-zone planes induces such variations on the CSSs.

We then show (section 3) how the use of an appropriately regularized form of the Schmid law inspired from those introduced for FCC plasticity can allow to accounting for crossed non glide stress effects between the slip planes which are expected to collaborate in the motion of the dislocations, and at first between the in-zone planes of each $\langle 111 \rangle$ slip direction. Some comparisons with typical data support sections 2 and 3. Section 4 concludes.

2. Variability on the Schmid flow criterion from multiplicity of slip plane types.

2.1. Primary variations on the critical shear stresses (CSSs) of different slip system types.

If well annealed single crystals are considered to have a homogenized microstructure of dislocations, all geometrically equivalent slip systems will be allowed to glide through this forest provided a same critical stress is reached. The Schmid law [1], as introduced from investigations on HCP crystals straining in basal slip experimentally establishes that a critical shear stress (CSS) or glide stress on the slip systems, $\tau_0^g = \tau_0$ for all g, is such a common threshold stress. Let first consider the slightly different assumption that well annealed single crystals have a homogenized microstructure of dislocations such that all N possible slip systems may be considered to contain identical initial densities even when they are not of a single same plane type {hkl}. This will be equivalent to the Schmid law for structures where all slip systems are identical and symmetric with regard to the slip direction but will not be equivalent otherwise.

The main notation conventions of this paper are summarized in **Table 1**. We denote σ the stress tensor applied on the crystal and $\tau^g = \sigma : \{m^g \otimes n^g\} = \sigma : R^g$ the applied resolved shear stress (ARSS) on a system g defined by the unit vector pair (m^g, n^g) in the slip direction and in the plane normal direction respectively (with $\{ \}$ standing for “symmetric part of”). The Schmid law, as historically defined, can be written simply as $\max_g \tau^g = \tau_0$.

Notations	Nomenclature
m^g	Unit vector in the slip direction of slip system g
n^g	Unit normal vector of the slip plane of slip system g
$R^g = \{m^g \otimes n^g\}$	Schmid tensor of slip system g for general stress tensor σ
$R^g = \cos(m^g, X)\cos(n^g, X)$	Schmid factor of slip system g for axial stress σ in direction X
$\tau^g = R^g : \sigma, \tau^g = R^g \sigma$	Applied resolved shear stress (ARSS) on system g for general and axial stress state
(ρ_0^g, ρ^g)	Dislocation density of system g, in the unloaded state and in the current plastic state
ρ_p^g	Dislocation density of system g of the primary active one
$(\tau_0^g, \tau_{c0}^g, \tau_c^g)$	Critical shear stress (CSS) of system g, in the unloaded state, at the plastic threshold and in the current plastic state
$\{hkl\}\langle uvw \rangle$	The slip system family with slip plane type and slip direction type of Miller indices h,k,l and u,v,w respectively
$(hkl)[uvw]$	The slip system with slip plane and slip direction of Miller indices h,k,l and u,v,w respectively
A, B, C, D	The four slip directions of the $\langle 111 \rangle$ type
$([a_0], a_0^{gh}), ([a], a^{gh})$	Load-free and load-affected matrix of the interaction coefficients between dislocation pairs of slip systems (g,h)

T/AT	Easy and Hard slip directions on $\{112\}$ slip plane types
D, D', D''	Dipolar dislocation pair interaction coefficients between systems of same $\{110\}$, $\{112\}T$ and $\{112\}AT$ slip plane types
C, C', C''	Collinear dislocation pair interaction coefficients between systems of same $\{110\}$, $\{112\}T$ and $\{112\}AT$ slip plane types
J, J', J''	Junction dislocation pair interaction coefficients between systems of same $\{110\}$, $\{112\}T$ and $\{112\}AT$ slip plane types
$C', C'', C''' = C'$	Collinear dislocation pair interaction coefficients between systems of $\{110\}/\{112\}T$, $\{110\}/\{112\}AT$ and $\{112\}T/\{112\}AT$ slip planes
$J', J'', J''' = J'$	Junction dislocation pair interaction coefficients between systems of $\{110\}/\{112\}T$, $\{110\}/\{112\}AT$ and $\{112\}T/\{112\}AT$ slip planes

Table 1: Main notation nomenclature

Considering the anisotropic extension of the Taylor “forest” hardening law as widely applied in plasticity analyses and modelling [24-26]:

$$\tau_c^g = \mu b \left(\sum_{h=1}^{N^+} a^{gh} \rho^h \right)^{1/2} \quad (1a),$$

it is quite natural to write for the initial situation, as it is implicitly done most of the time, $\rho^h = \rho_0 \forall h$ rather than $\tau_c^g = \tau_{c0} \forall g$, what yields:

$$\tau_{c0}^g = \mu b \left(\sum_{h=1}^N a^{gh} \rho_0 \right)^{1/2} = \mu b \left(\sum_{h=1}^N a^{gh} \right)^{1/2} \sqrt{\rho_0} \quad (1b).$$

Compared to Eq. (1a), the Eq. (1b) with $N \leq N^+ = N + N_J$ disregards any secondary obstacle storage and especially second order junctions which may belong to non slip planes N_J [15, 27-30] and which are considered of negligible hardening contributions at the onset of the plastic regime. However, Eq. (1b) may not exactly represent the strictly unloaded state [31] which is in general hardly accessible to the measure, because some dislocation mobility and multiplication starts from the load application. It is already a load-affected measure of the true initial CSSs that would need to be written:

$$\tau_0^g = \mu b \left(\sum_{h=1}^N a_0^{gh} \rho_0 \right)^{1/2} = \mu b \left(\sum_{h=1}^N a_0^{gh} \right)^{1/2} \sqrt{\rho_0} \quad (2a).$$

Let first ignore the difference between the “effective” coefficients of Eq. (1b) and the real ones of Eq. (2a) that will be an important issue in the following. As far as $a^{gh} = a_0^{gh}$, the coefficient $\left(\sum_{h=1}^N a_0^{gh} \right)^{1/2}$ in Eq. (2a), equal to $\left(\sum_{h=1}^N a^{gh} \right)^{1/2}$ in Eq. (1b), is an equal constant for all the g systems when all the h systems in the sum are of a same type and are symmetric for glide (each h system must be regarded in the sense of the positive shear stress on it, what can only be fixed once the applied load is specified). This constancy results from the form of the NxN coefficient matrix $[a_0]$,

of which all lines and all columns contain in this case the same N terms. Thus, a primary source of variations on the CSSs comes from the no more equal coefficients $\left(\sum_{h=1}^N a_0^{gh}\right)^{1/2}$ for all g systems when several system types are present in the sum [9, 32], with two different situations whether the involved families of slip systems are all symmetric for glide or not. If all systems are (or are considered as) symmetric, the $[a_0]$ matrix is divided into sub-blocks but remains invariant for any mode and orientation of load. In that case, the different types of slip systems may have different initial CSSs but these CSS values are invariant with regard to the load orientation and sign. This is a commonly used assumption in non FCC metals with several families of slip systems, even when systems are not necessarily symmetric and although it is not correct then. In the cases involving asymmetric slip system types with regard to glide, sub-blocks of the $[a_0]$ matrix involve “easy-oriented” and “hard-oriented” systems in a way which in general breaks the global matrix invariance and which introduces an orientation-dependent T/AT partition, “T” and “AT” denoting the easy and hard slip direction respectively, in reference to twinning and anti-twinning.

Applied to the BCC crystals when considering $\{110\}$ symmetric and $\{112\}$ asymmetric planes, for P of the 12 $\{112\}\langle 111\rangle$ systems being T -oriented (denoted ‘) and 12-P being AT -oriented (denoted ‘’) the initial CSSs must at least be written from Eq. (2a):

$$\begin{aligned}\tau^g &= \tau_0^g = \mu b \left(\sum_{h=1}^{12} a^{gh} + \sum_{h'=1}^P a^{gh'} + \sum_{h''=P+1}^{12} a^{gh''} \right)^{1/2} \sqrt{\rho_0} \\ \tau^{g'} &= \tau_0^{g'} = \mu b \left(\sum_{h=1}^{12} a^{g'h} + \sum_{h'=1}^P a^{g'h'} + \sum_{h''=P+1}^{12} a^{g'h''} \right)^{1/2} \sqrt{\rho_0} \\ \tau^{g''} &= \tau_0^{g''} = \mu b \left(\sum_{h=1}^{12} a^{g''h} + \sum_{h'=1}^P a^{g''h'} + \sum_{h''=P+1}^{12} a^{g''h''} \right)^{1/2} \sqrt{\rho_0}\end{aligned}\quad (2b)$$

The number of systems P depends on the load orientation and sign: changing the applied load σ to $-\sigma$ amounts to interchanging the T-oriented (‘) and the AT-oriented (‘’) systems in Eq. (2b).

The load dependency of Eq. (2b) results from the nature and characteristics of the interacting dislocation pairs as represented by the matrix $[a_0]$. The typical 24x24 $[a_0]$ matrix for BCC crystals has been shown to contain 17 different coefficients on a geometrical basis [32] and even more if asymmetry of $\{112\}$ planes enters the picture [9]. The relative values of these coefficients also depend on the metal and of its purity, they are not strictly constant with plastic strain, and they are also likely sensitive to temperature and to the general applied conditions, but these general effects are not to be considered here.

Some anisotropy and possible asymmetry estimates have been provided from latent hardening tests (room temperature, tension or compression) several decades ago for alpha iron and Fe-Si alloys mainly [6,9]. More recently, calculations from dislocation dynamic methods have partly filled this matrix, for the $\{110\}\langle 111\rangle$ systems first [33, 34] and with partial indications for the $\{112\}\langle 111\rangle$

systems as well [32], under assumption of elastic isotropy. To the author's knowledge, no coefficients have been yet published for $\{110\}$ - $\{112\}$ and $\{112\}$ - $\{112\}$ interactions in relation to these indications or from other sources.

From the extended system notation used in [9,32], the **Table 2** lists in anti-clockwise rotation around each of the A,B,C,D $\langle 111 \rangle$ direction of slip the 3 $\{110\}$ - left column - and the 3 $\{112\}$ - right column - in-zone planes for the BCC structure.

Notation	Plane	b	Notation	Plan	b
2A	(0-11)	[-111]	6'A	(1-12)T	[-111]
3A	(101)	[-111]	2''A	(211)AT	[-111]
6A	(110)	[-111]	3'A	(12-1)T	[-111]
2B	(0-11)	[111]	4''B	(1-21)AT	[111]
5B	(-110)	[111]	2'B	(2-1-1)T	[111]
4B	(-101)	[111]	5''B	(11-2)AT	[111]
1C	(011)	[-1-11]	3''C	(-121)AT	[-1-11]
5C	(-110)	[-1-11]	5'C	(112)T	[-1-11]
3C	(101)	[-1-11]	1''C	(2-11)AT	[-1-11]
1D	(011)	[1-11]	6'D	(-112)T	[1-11]
4D	(-101)	[1-11]	1''D	(21-1)AT	[1-11]
6D	(110)	[1-11]	4'D	(-1-2-1)T	[1-11]

Table 2: The list of the $\{110\}\langle 111 \rangle$ and $\{112\}\langle 111 \rangle$ slip systems. The anti-clockwise rotation around direction A for example first yields the set $2A-6'A-3A-2''A-6A-3'A-\bar{2}A$, of $T-AT-T$ type and second the converse set $\bar{2}A-6''A-\bar{3}A-2'A-\bar{6}A-3''A-2A$, of $AT-T-AT$ type.

The arrangement of these planes around a slip direction is a succession of $\{110\}$ - $\{112\}$ T and $\{110\}$ - $\{112\}$ AT pairs, with a 30° angle between any two consecutive planes, as exemplified in **Figure 1 left** around the $A = [-111]$ direction.

The $\{112\}$ T $\langle 111 \rangle$ systems are in general found easier to activate than the $\{112\}$ AT $\langle 111 \rangle$ ones with a CSS difference of typically 5 to 13%. The $\{110\}\langle 111 \rangle$ systems have a CSS more likely on the $\{112\}$ T side, either over or below. In terms of pair interaction types, the picture issued from recent DD simulations [32-35] mainly distinguishes at first the self and coplanar interactions, named dipolar interactions (to be denoted D), for which there are no forest interaction types (the dislocations glide in parallel planes), in second all the forest interaction types, named junction interactions (denoted J) since they in general create a junction product, and thirdly the collinear interactions (denoted C), which are the special case of junction interactions when the interacting

segments annihilate each other. These interaction types range with increasing strengths in the order $D \leq J < C$, more or less tempered by the interacting pair type. This is examined in more details in the next section.

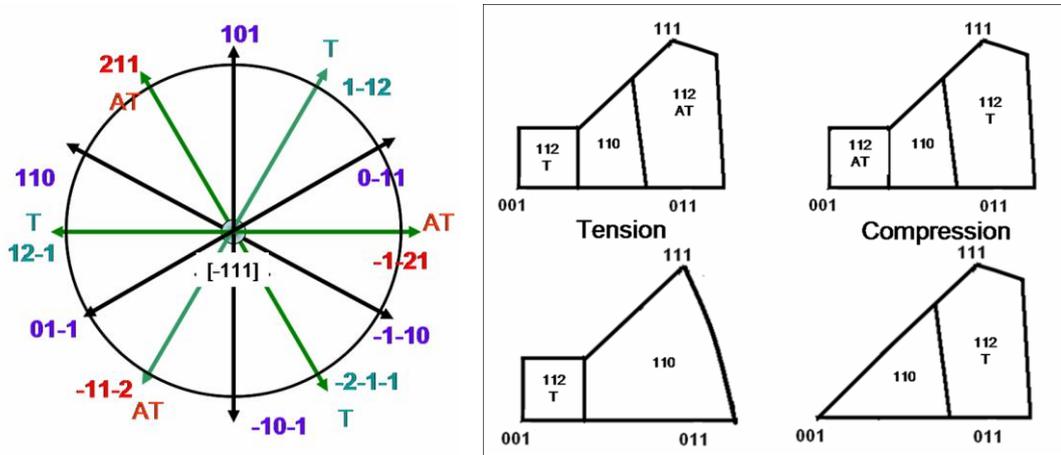


Figure 1: (left) the 3 $\{110\}$ and 3 $\{112\}$ in-zone planes for each $\langle 111 \rangle$ slip direction, exemplified for direction $A=[-111]$, with alternated easy and hard slip on $\{112\}$ planes if asymmetric; (right): domains of maximum ratio $R^s / \tau_{c_0}^s$ for $A=\{112\}T$, $B=\{110\}$ and $C=\{112\}AT$ planes for (top) all equal CSSs and of prohibited $\{112\}AT$ slip in tension (bottom left) and compression (bottom right).

2.2. Typical CSS variations from simplified asymmetry features in the interaction matrix $[a_0]$.

Geometrically for BCC metals, as can be seen in the matrix $[a_0]$ presented in **Table 3** (according to the notation of **Table 2** where colours are used to represent the different interaction types), there are three dipolar coefficients (2 self-hardening and one coplanar), four collinear coefficients and all the rest are junction coefficients of different strengths. According to the interacting plane pair, some of these coefficients can be duplicated up to five terms.

In order to simplify the discussion without too much loss of generality, we consider the matrix reducible to six collinear coefficients and six junction coefficients for the 6 $\{110\}$ - $\{110\}$, $\{110\}$ - $\{112\}T$, $\{110\}$ - $\{112\}AT$, $\{112\}T$ - $\{112\}T$, $\{112\}T$ - $\{112\}AT$ and $\{112\}AT$ - $\{112\}AT$ possible plane pairs and to three dipolar coefficients for the 3 $\{110\}$ - $\{110\}$, $\{112\}T$ - $\{112\}T$ and $\{112\}AT$ - $\{112\}AT$ identical plane pairs.

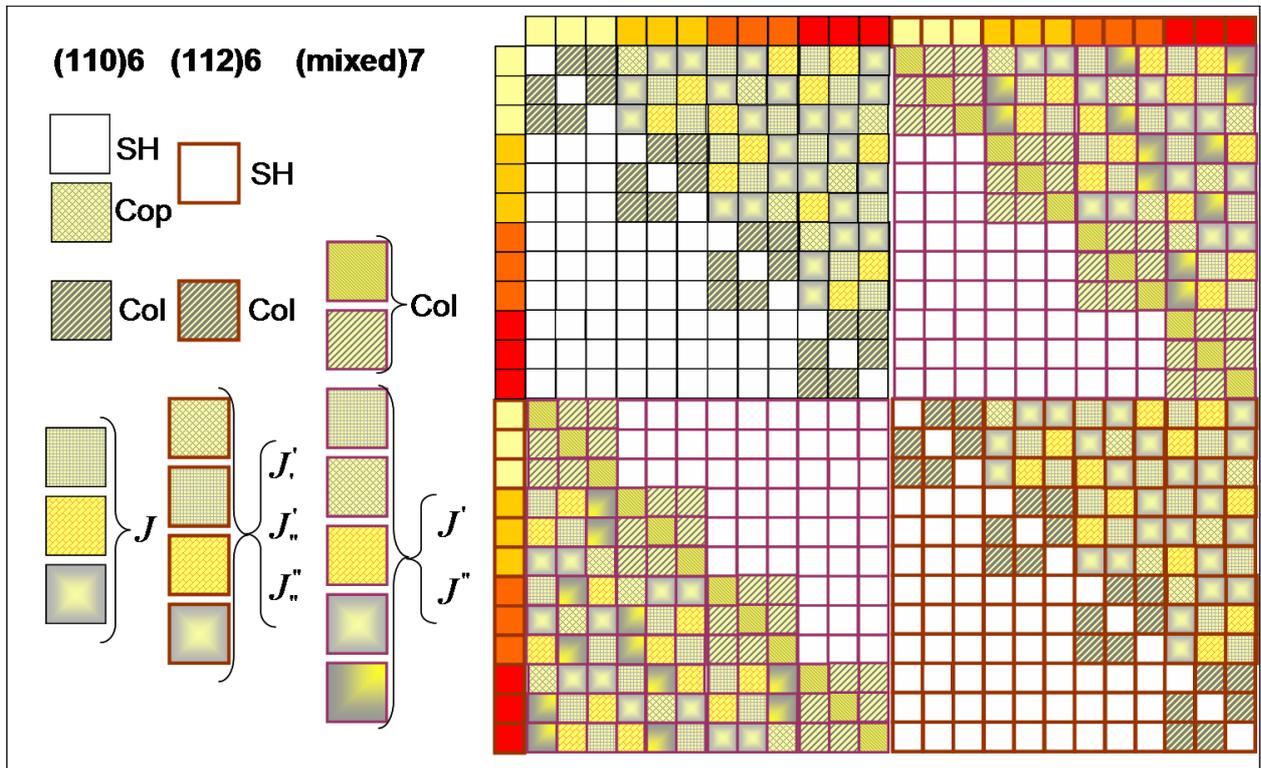


Table 3: The 24×24 matrix $[a]$ of geometrical pair dislocation interactions in BCC crystals for 12 $\{110\}$ and 12 $\{112\}$ slip planes. The matrix assembles four 12×12 $\{110\}$ - $\{110\}$, $\{112\}$ - $\{112\}$ and $\{110\}$ - $\{112\}$ = $\{112\}$ - $\{110\}$ blocks. The blocks assemble four triplets of collinear systems. The various T/T , T/AT , AT/AT pair combinations of planes yields various coefficients as exemplified for Junctions terms J only.

We denote respectively these coefficients C , D , J for the $\{110\}$ pair type, C' , J' and C'' , J'' for the duplicate (T and AT) mixed pair types $\{110\}$ - $\{112\}$ and C' , D' , J' , $C'' = C''$, $J' = J''$ and C'' , D'' , J'' for the three $\{112\}$ pair types ($T-T$, $T-AT$ and $AT-AT$)³. This simplified matrix still contains 15 coefficients, an example of which will be given and used in the following. In this simplified context it is quite safe to assume $C' < C''$, $D' < D''$, $J' < J''$ and $C' \leq C''$, $J' \leq J''$ as resulting from the assumed T/AT asymmetry but little is known for the rest of the coefficients. If there is some support that $D' < D''$, $C' < C''$ and $J' < J''$ rather than the converse or even equality, it is highly conjectural to say whether $C'' = C'$ is intermediate or not between C' , C'' (resp. for $J'' = J'$ and J', J''). The number of opened possibilities is still too high for hoping a fully quantitative comparison of the CSSs without further information on the coefficients. However, more than qualitative insights are at hand.

³ Since there are no coplanar systems in $\{112\}$ planes, the parameter $D'' = D''$ does not exist.

The Table 2 integrates one more key information for the here considered purpose: as far as resolved shear stresses on the various planes are first of concern, the 6 planes with positive ARSS are alternatively a $\{110\}$ plane and a $\{112\}$ plane. The $\{112\}$ planes are alternatively in T and in AT orientation such as to form either a $T-AT-T$ or an $AT-T-AT$ set, as illustrated in Figure 1 left. The former (resp. latter) set is referred to as the “hard” (resp. “easy”) set since the dominant characteristic, as will appear in the forthcoming discussion, is the type of the most highly stressed of the three $\{112\}$ planes, which is the one at the central position in the set, and not by the number of each plane type T vs AT in a triplet. Consequently for the $[a_0]$ matrix in Table 3, each of the four triplets of columns from n°13 to n°24 obeys either one or the other of these two possible sets, with at total three possibilities of set combinations for the twelve columns of the matrix:

- a) All the four triplets obey the same $T-AT-T$ or $AT-T-AT$ set;
- b) Three triplets obey the same set while the fourth one obeys the dual set; (3)
- c) The two sets equally appear for two of the four triplets.

In addition to the different situations listed in Eq. (3), one further source of variability is that taking any line of the matrix, three of the four interaction triplets assemble 3 junction coefficients while the fourth one assembles either 3 collinear coefficients (for the $\{110\}$ planes of lines n°1-12) or 2 collinear + 1 dipolar coefficients (for the $\{112\}$ planes of lines n°13-24). As summarized in **Appendix A**, all the resulting combination possibilities yield different values of the coefficient sum $S_g = \sum_{h=1}^N a_0^{gh}$, not only between the different system types, as S_{110} , $S_{(112)T}$ and $S_{(112)AT}$, but also, and only due to the T/AT asymmetry, *within* each family of slip planes.

Depending on the metal and on the test conditions, these differences may not be necessarily small compared with the total sum of the 24 coefficients of a line of the matrix.

Such differences due to slip asymmetry can consequently introduce a possibly noticeable fluctuation on the CSSs from one system to another, especially among systems of same slip plane type.

The variations on the sums of coefficients defining the CSSs depend on the variation in the matrix $[a_0]$ through the orientation and sign of the applied load on the crystal. The way these variations depend on the loading orientation and sign is next exemplified and compared with experimental information. Some crystallographic representations of the crystal structure and of the slip system characteristics need first be recalled or introduced.

2.3. Load orientation and sign dependency of the CSS primary variations.

In the case of uniaxial loading, a reference domain for each of the $\{110\}$, $\{112\}T$ and $\{112\}AT$ slip is drawn on **Figure 1 right** in the two particular cases of (top) isotropic CSSs on the three slip plane

type, say $\tau_0^{g''} = \tau_0^g = \tau_0^{g'}$, which is equivalent in tension (left) and compression (right) and of (bottom) asymmetric CSSs when $\tau_0^g = \tau_0^{g'}$ with $\tau_0^{g''}/\tau_0^g \geq 2/\sqrt{3}$ such that $\{112\}$ AT slip is impossible, such that the T and AT domains are interchanged from tension (left) to compression (right)⁴.

The **Figure 2** left reports on a $[001]$ pole figure the domains of activity for slip in the $[-111]$ direction under the assumption of slip on the maximum resolved shear stress (MRSS) plane. Under this assumption, any loading axis in the coloured area would activate the $A=[-111]$ slip direction. This figure, to be compared to the Figure 1 right, also plots:

- i) the projected trace of the cône at 45° around the $[-111]$ slip direction on which the Schmid factor equal 0.5 on this MRSS plane;
- ii) the $\langle 110 \rangle$ and $\langle 112 \rangle$ directions normal to the in-zone planes of concern, identical to those plotted in Figure 1 left;
- iii) the definition of the χ angle between the trace of the MRSS plane for some loading axis and the most nearby $\{110\}$ plane which ranges between -30° and $+30^\circ$.

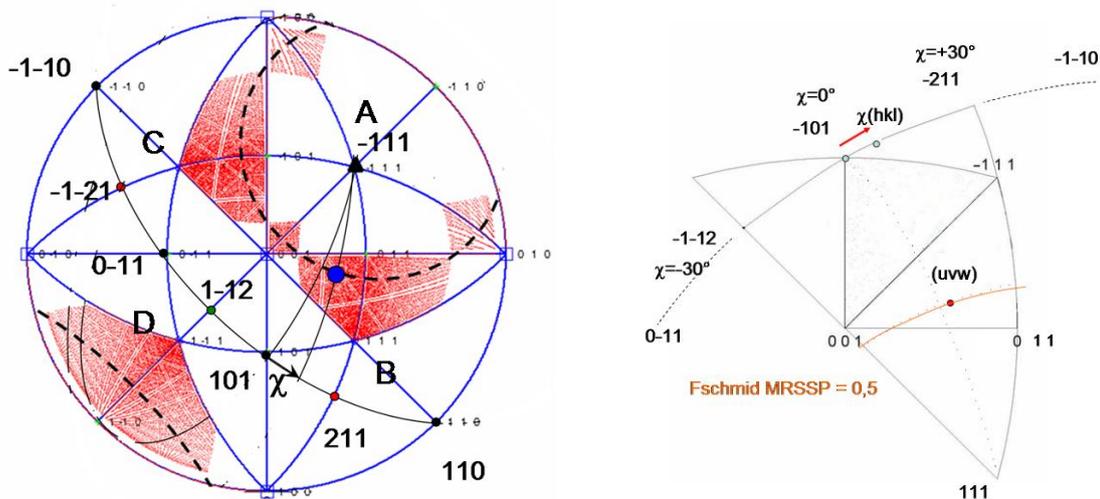


Figure 2: (left) the domains of activity for slip in the $[-111]$ direction under the assumption of slip on the MRSS plane, with the corresponding cone of maximum (0.5) Schmid factor, the in-zone $\{110\}$ and $\{112\}$ planes and the χ angle definition; (right) details of the in-zone planes of the $[111]=B$ slip direction. The symmetry plane which shares the reference triangle into a $AT-T-AT$ and a $T-AT-T$ set passes through $[111]$ and $[-101]$.

On the **figure 2 right**, one sees the T and AT domains of (112) slip with regard to the slip direction $B=[111]$ in term of the χ angle in the $\{111\}$ plane: they respectively correspond to the negative and

⁴ $(4/3)^{1/2}$ is the limit CSS ratio for the activation of slip on a $\{112\}$ plane rather than on a $\{110\}$ one for uniaxial loading, in the Schmid law framework. There is no loading mode to increase further this ratio.

positive values of χ for tension in the concerned reference triangle and to the converse for compression.

2.3.1. Variations from the matrix $[a_0]$ asymmetry features. If one draws the same figure as in figure 2 right for all four slip directions as they appear in figure 2 left, one obtains the partition of the reference triangle for the $[-111](101)$ system 3A which is drawn in **Figure 3**. This partition shows 7 areas Z_i where the system combinations are different as collected in **Table 4** for a tensile test. It is striking that the easy side of $\{112\}$ slip (in tension) is entirely covered by a unique (Z_1) zone, while the hard side shares into 6 different zones. This partition is *not* reversed in compressive loading which commutes the T and AT domains compared with tension but does not modify the relative extensions of the Z_i zones. It means that reversing the load does not simply reverse the T/AT symmetry as widely assumed when asymmetry is taken into consideration.

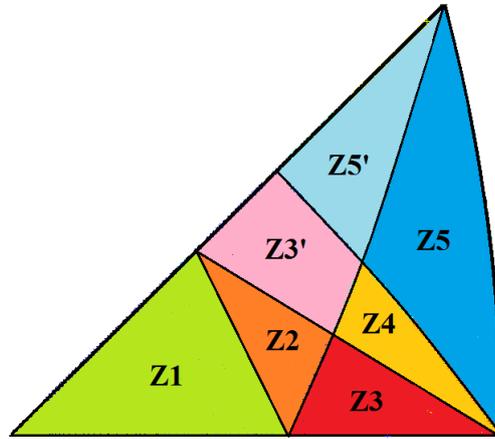


Figure 3: The partition of a reference triangle (here the one corresponding to the $[-111]=A$ slip direction) with regard to the symmetry planes of the four slip directions (as defined for B in Fig.2).

$[-111]$	A (C)	B (J)	C (J)	D (J)	$\{110\}$
Z1	T	T	T	T	$\delta C + 3\delta J$
Z2	AT	T	T	T	$-\delta C + 3\delta J$
Z3	AT	AT	T	T	$-\delta C + \delta J$
Z3'	AT	T	T	AT	$-\delta C + \delta J$
Z4	AT	AT	T	AT	$-\delta C - \delta J$
Z5	AT	AT	AT	T	$-\delta C - \delta J$
Z5'	AT	T	AT	AT	$-\delta C - \delta J$

Table 4: The various combinations of $AT - T - AT$ and $T - AT - T$ sets (tension sign) for the Z_i zones of the reference triangle for the $[-111]=A$ slip direction and the differences in CSSs on the primary plane $\{110\}$. All sets are reversed in compression.

The 45° cone of 0.5 Schmid factor (dashed line) around $[-111]$ crosses the zones Z1, Z2, Z4 and Z5, and very slightly enters the zone Z3 since the common “point” to the four zones Z2,Z3,Z3',Z4 corresponds with direction $[135]$ at $46,9^\circ$ from $[-111]$. In the central part of the triangle where a $\{110\}$ plane has the highest Schmid factor and consequently the highest chance to be activated, in both tension and compression, the CSS of the system can take different values into the different zones. As shown in Table 4, for tension the number of $T-AT-T$ triplets (denoted "AT" for short) increases from Z1 to Z5, with none in Z1, one in Z2, two in Z4 and three in Z5 (one being a collinear triplet).

As it appears from Table 4 for the total of the $\{110\}$ slip zone, the coefficient sum is expected to stepwise decrease going from Z1 zone to Z5 zone, with a constant value inside each Zi zone.

Experimental measurements allowing to checking CSS variations are rare: a significant one that comes from [7] is reported in **Figure 4 left**.

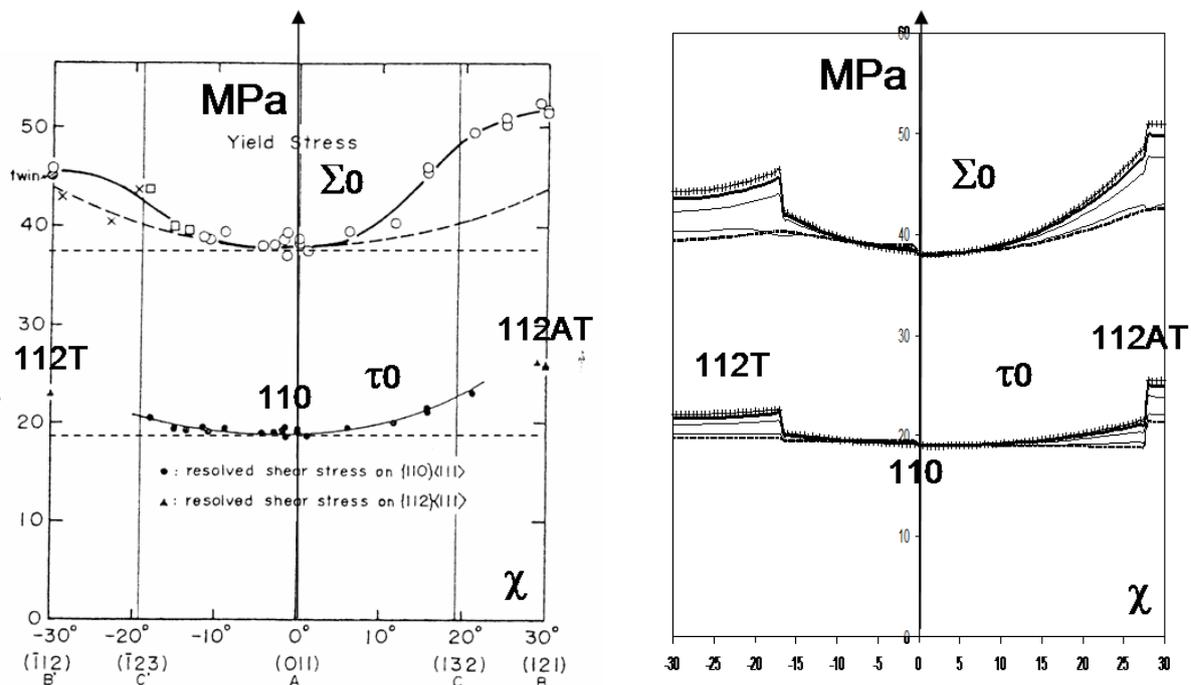


Figure 4: (left) typical CSS and related yield stress variations from one side to the other of a reference triangle Fe-Si crystals from [5,7]; (right) corresponding simulations from considering an appropriate set of coefficients for the interaction matrix $[a]$ and for different levels of cross-slip terms.

From these tensile test results (which follow the cone of 0,5 Schmid factor), the CSS appears lower in the middle of the domain of $\{110\}$ slip and becomes, in a continuously varying manner, higher going towards the right “hard” side than towards the left “easy” one, slip being still of $\{110\}$ plane type. At both ends of this $\{110\}$ domain, the $\{112\}$ slip corresponds with a higher CSS which is

higher on the “hard” side than on the “easy” one, as expected. This continuous variation of the CSS for $\{110\}$ slip disagrees with the stepwise variation described from the Zi zones. Another effect seems involved.

2.3.2. Variations from collinear slip effects. Let then consider the effective coefficients as introduced in section 2.1 to define effective interaction coefficients, say $a^{gk} \neq a_0^{gk}$ in Eqs (1b) and (2a). The difference between the real coefficients of Eq. (2a) and the “effective” coefficients in Eq. (1b) results from the early dislocation motions under load, say early dipolar and collinear interactions for a fraction of the primary dislocation density. We consider a single slip situation in the sense of a dominant Schmid factor on a single slip system G and we take a load orientation on the cone of 0.5 maximal values. The measured CSSs for primary systems G of any one of the three slip plane types $(hkl) = \{110\}$, $\{112\}T$ and $\{112\}AT$ as primary system can be written, following dislocation dynamics information [35]:

$$\tau_{c0}^G = \mu b \sqrt{\sum_{L(\neq G)=1}^N a_0^{GL} + \eta \left(a_0^{GG} + k \sum_{L=C110(G)} a_0^{GL} \left(\frac{R^L}{R^G} \right)^2 + k' \sum_{L'=C112T(G)} a_0^{GL'} \left(\frac{R^{L'}}{R^G} \right)^2 + k'' \sum_{L''=C112AT(G)} a_0^{GL''} \left(\frac{R^{L''}}{R^G} \right)^2 \right)} \sqrt{\rho_0} \quad (4).$$

The system number in the three sums of collinear contributions (where $C110(G)$, $C112T(G)$ and $C112AT(G)$ respectively denote the L , L' and L'' collinear planes of each type to G) depend on the G system type and on the load orientation. R^G is the Schmid factor for the system G and similarly for systems L , L' and L'' . Eq. (4) details the additional terms due to the load effect on the initial CSSs: ρ_0 being the common initial density on all systems in the unloaded state, the applied load modifies the primary dislocation density such that $\rho_{p(G)} = \eta \rho_0$. All the additional dislocation contributions are a fraction of this primary one. The three groups of collinear contributions, corresponding to the three types of slip planes, contribute with the dipolar coefficient a_0^{GG} to an effective (or measured) dipolar coefficient, a^{GG} say. This is the unique coefficient that is significantly affected in single slip, but in more general loading situations the cross slip events can affect several terms of the interaction matrix. In order to make this formula clear, it is exemplified for the case of the slip direction $A = [-111]$ and for a primary slip on the planes $(12-1)T$, $(211)AT$ and (110) which correspond to the primary systems $3'A$, $2''A$ and $6A$ according to table 2. The in-zone planes which are involved appear in Figure 1 left. In these examples, Eq. (4) reads:

$$\frac{\tau_{c0}^{12\bar{1}T}}{\mu b \sqrt{\rho_0}} = \sqrt{\sum_{L \neq 12\bar{1}T}^N a_0^{12\bar{1}T/L} + \eta \left(D' + k C' \left(\left(\frac{R^{0\bar{1}\bar{1}}}{R^{12\bar{1}T}} \right)^2 + \left(\frac{R^{101}}{R^{12\bar{1}T}} \right)^2 \right) + k'' C'' \left(\left(\frac{R^{211AT}}{R^{12\bar{1}T}} \right)^2 + \left(\frac{R^{\bar{1}\bar{1}2AT}}{R^{12\bar{1}T}} \right)^2 \right) \right)}$$

$$\frac{\tau_{c0}^{211AT}}{\mu b \sqrt{\rho_0}} = \sqrt{\sum_{L \neq 211AT}^N a_0^{211AT/L} + \eta \left(D'' + kC'' \left(\left(\frac{R^{0\bar{1}\bar{1}}}{R^{211AT}} \right)^2 + \left(\frac{R^{101}}{R^{211AT}} \right)^2 \right) + k'C'' \left(\left(\frac{R^{12\bar{1}r}}{R^{211AT}} \right)^2 + \left(\frac{R^{\bar{1}\bar{1}2T}}{R^{211AT}} \right)^2 \right) \right)}$$

$$\frac{\tau_{c0}^{110}}{\mu b \sqrt{\rho_0}} = \sqrt{\sum_{L \neq 110}^N a_0^{110/L} + \eta \left(D + kC \left(\left(\frac{R^{0\bar{1}\bar{1}}}{R^{110}} \right)^2 + \left(\frac{R^{101}}{R^{110}} \right)^2 \right) + k'C' \left(\frac{R^{12\bar{1}r}}{R^{110}} \right)^2 + k''C'' \left(\frac{R^{211AT}}{R^{110}} \right)^2 + k^*C^* \left(\frac{R^{\bar{1}\bar{1}2^*}}{R^{110}} \right)^2 \right)}$$

For the CSS on the (110) plane, the last contribution denoted with an asterisk is either on the (1-12) T plane or on the (-112)AT one depending on whether the maximum shear is on the side of the (12-1)T plane or on the side of the (211)AT plane. In both case this contribution is the smallest one and vanishes when the maximum shear is exactly on the (110) plane (see Figure 1 left).

The k, k', k'' coefficients for each cross slip group⁵ are taken such that $k > k' > k''$ in order to represent easier cross slip on {110} planes than on {112}T ones and easier as well on {112}T planes than on {112}AT ones. A precise simulation of the variations on the CSSs needs to estimate them from the knowledge of the coefficients of the matrix $[a_0]$ and of the k, k', k'' coefficients, what is still in progress for the {112} planes of BCC metals. The comparative simulations reported in **Figure 4 right** make use of the interaction coefficients reported in **Table 5**. These coefficients are consistent with the literature for the {110} planes, while for the {112} planes they have been “reasonably conjectured”. Values for k, k', k'' have been taken equal to 0.8, 0.4 and 0.2 with values for η of 15, 10, 5 and 1 in the exemples reported (from top to bottom) in Figure 4 right. The also plotted reference case of no cross slip contribution corresponds with $\eta = 1$ and $k = k' = k'' = 0$ (discontinuous lowest plot).

	110-110	110-112T	110-112AT	112T-112T	112T-112AT	112AT-112AT
D	0,007	/	/	0,008	/	0,01
J	0,07	0,072	0,095	0,08	0,098	0,1
C	0,7	0,72	0,95	0,8	0,98	1

Table 5: The dislocation interaction coefficients used in the simulations of figure 4 right.

According to the experimental comparison data, the presented plots show simultaneously the CSS and the related yield stress. Thanks to the cross-slipped contributions in Eq. (4), the reported plots reproduce qualitatively the continuous CSS variation of {110} slip with a minimum value at $\chi = 0$ as reported in Figure 4 left from the experiments in [7]. This well supports such a cross slip effect on

⁵ The unique scalar that is required in FCC crystals to account for this cross-slip effect should in fact be extended into a 3x3 “cross-slip coefficient matrix”, owing to the three different cases of G system type. This matrix being unknown so far, the three k, k', k'' coefficients represent a minimal form of it, for our discussion purpose.

the measured CSSs, owing to the many collinear systems at 30° apart of each other. Applying Eq. (4) to FCC crystals is not expected to affect the classical form, for the opposite reason of too few (2) collinear systems for each slip direction, and the collinear plane being at an angle of 71° or 109° of a primary active one such that $(R^c / R^p)^2 \ll 1$ for all load orientations in a reference triangle.

So far, the variability on the Schmid law which is shown to result from slip asymmetry and orientation-dependency effects on the CSSs remain consistent with the assumption of slip activation when a critical shear stress from the forest hardening model is reached. The assumption that unstrained (well annealed) crystals have an initially homogeneously distributed dislocation density on all the slip systems that may contribute to plastic straining coincides with having identical CSSs only when all the slip systems are of a same type and are symmetric. Unless when cross slipping systems are not significantly involved, as is the case in FCC crystals (except in recovery stages), measured CSSs may correspond with not all identical “initial” dislocations densities on all the systems, what further increases the possible variations on the Schmid law. At total, asymmetry characteristics of the CSSs can “normally” result from the asymmetry features of the dislocation interactions either through the coefficient matrix $[a_0]$ or through the differences in cross slipping ability as represented in Eq. (4) by the k, k', k'' coefficients.

In addition to these CSS variations, the specific not planar core structure of the dislocations makes unlikely a flow criterion only depending on the glide stress on each plane. Regardless a priori of the exact coupling type between the planes which collaborate in the motion of a dislocation, regularized forms of the Schmid law are in the next part shown capable to express in flexible manner interactions or coupling between “collaborative” system groups and especially between collinear systems.

3. A piece-wise regularized Schmid law for non glide stress effects on dislocation motion.

The slip in BCC crystals often appears wavy and this waviness attests of the importance of collinear slip, in likely connexion to the dislocation core structure as pointed in the beginning. The mean slip traces, when corresponding to a single active direction, are *always* oriented in between two neighbouring and 30° apart planes of the in-zone set. The most highly sheared plane pair is either of the $\{110\}$ - $\{112\}$ T type or of the $\{110\}$ - $\{112\}$ AT one. The first orientation range corresponds with a $AT - T - AT$ set and conversely the second range corresponds with a $T - AT - T$ set, as can be seen in Figure 2 right.

The classical Schmid law considers all the slip systems to be independent of each other and this is a major reason for it to not be fully appropriate when dislocations can spread and move on several slip planes. The here considered regularized form of Schmid law for BCC crystals aims at accounting for the expected interactive collaboration between in-zone planes to achieve the dislocation motion and the plastic slip, as is supported by the evidenced role of cross slipping contributions in the expression of the CSSs.

3.1. Regularized forms of the Schmid law and interacting slip systems.

Under its generalized or current form, the Schmid law in elasto-plastic frameworks can be written in terms of individual plastic potentials F^g for each slip system g as:

$$\max_{g \in (1, N)} \left(\frac{\tau^g}{\tau_c^g} - 1 \right) = \max_{g \in (1, N)} F^g = 0 \quad (5a),$$

with $\max(dF^g) = 0$ (say $d\tau^g = d\tau_c^g$) the consistency condition of plastic flow for those of the potentially active systems (e.g. those, among N , which fulfil Eq. (5a)) to be effectively active. Regularized forms for Eq. (5a) have been examined in [36, 37], generalizing [38, 39] and [40]. This regularized Schmid flow criterion which depends on a n exponent takes the form:

$$F_n = \left(\sum_{g=1}^N \left(\frac{\tau^g}{\tau_c^g} \right)^n \right)^{1/n} - 1 = 0 \quad \text{with} \quad dF_n = 0 \quad (5b).$$

The Eq. (5b) (where the slip systems are involved in the positive direction of their resolved shear stress as usual) was firstly a one-potential regularization of Eq. (5a) with $n \gg 1$ which provides an elasto-plastic alternative framework to the visco-plastic models of crystal plasticity [27], with some advantages especially for computational implementation in finite element codes. But it also introduces, as pointed in [36], a modulated coupling between the N slip systems of the structure, the higher when the closer to unity reduces the n exponent. Decreasing n is for example of use to represent temperature or strain rate effects, what is generally related to an increase of deviated slip contributing to the plastic strain.

Thus, in order to accounting for the frequent collinear slip occurrence in BCC crystals, it makes some sense to group, as done in Eq. (5b) for all slip systems, the slip systems which can be involved collaboratively for each of the P (=4) slip directions $\langle 111 \rangle$, which are the in-zone planes of each direction. So doing, we end up with a fourfold set of plastic potentials associated with the slip directions as:

$$\max_{G \in (1, P)} \left(\left(\sum_{g=1}^{N(G)} \left(\frac{\tau^g}{\tau_c^g} \right)^m \right)^{1/m} - 1 \right) = \max_{G \in (1, P)} F_m^G = 0 \quad (6a).$$

The effectively active slip directions among those fulfilling Eq. (6a) are the solution of the system $\max_{G \in (1,P)} (dF_m^G) = 0$. This form, where $m > 1$ but not necessarily $m \gg 1$, clearly introduces a “tuneable” coupling between the in-zone planes for each slip direction, the intensity of which is the higher when the lower is m . It is a particular type of non glide stress effect in the sense that each slip plane activity does not any more only depend on its own glide stress but also on the positive glide stresses on the other in-zone $\{110\}$ and $\{112\}$ slip planes for each slip direction.

Eq. (6a) is still a multi-potential criterion allowing in particular for several solutions when several systems (or here directions) are symmetrically loaded [41, 42]. Such criteria matter when examining instability situations at the singularities of only piece-wise convex yield surfaces. But it is also possible to account for the same coupling as in Eq. (6a) within a fully regularized one-potential form in extending Eq. (5b) as:

$$F_{n,m} = \left(\sum_{G=1}^P \left(\sum_{g=1}^{N(G)} \left(\frac{\tau^g}{\tau_c^g} \right)^m \right)^{n/m} \right)^{1/n} - 1 = 0 \quad \text{with} \quad dF_{n,m} = 0 \quad (6b).$$

In Eq. (6b), the intensity of the interaction between in-zone planes is still represented by $1 \leq m \leq n$, still with $n \gg 1$ (unless strain-rate or temperature effects to be globally accounted for). Eq. (6b) is the regularized form of Eq. (6a). If $m = n$ one simply retrieves Eq. (5b) which is the regularized form of the Schmid flow criterion of Eq. (5a).

We next on exemplify our purpose on Eq. (6a), the case of Eq. (6b) yielding a similar analysis with the same difference as between Eqs (5a) and (5b) that the regularization enforces all systems to contribute at least infinitesimally to the flow in a unique solution. For uniaxial loading σ , the Eq. (6a) yields with writting $\tau^g = R^g \sigma_{0(m)}$ and R^g the Schmid factor of the g system, the m -dependent elastic limit:

$$\sigma_{0(m)} = \min_{G \in (1,P)} \left(\sum_{g=1}^{N(G)} \left(\frac{R^g}{\tau_0^g} \right)^m \right)^{(-1/m)} \quad (7).$$

Disregarding primary variations on the CSSs as those discussed in section 2, the CSSs $\tau_0^g, \tau_0^{g'}, \tau_0^{g''}$ (for the $\{110\}$, $\{112\}T$ and $\{112\}AT$ plane types respectively) are taken orientation-independent. For each group of 6 systems in-zone of one $\langle 111 \rangle$ slip direction, it comes, with $s = 1$ or 2 for respectively a set $AT - T - AT$ or a $T - AT - T$ one in the group:

$$\sum_{g=1}^6 \left(\frac{\tau^g}{\tau_0^g} \right)^m = \sum_{g=1}^3 \left(\frac{\tau^g}{\tau_0^g} \right)^m + \sum_{g'=1}^s \left(\frac{\tau^{g'}}{\tau_0^{g'}} \right)^m + \sum_{g''=s+1}^3 \left(\frac{\tau^{g''}}{\tau_0^{g''}} \right)^m \quad (8).$$

Now consider axial loading directions \mathbf{X} on the cone at 45° around the considered slip direction \mathbf{A} , as drawn in Figure 2 when $\mathbf{A} \equiv [-111]$. They correspond to loading orientations for which the Schmid factor on the related MRSS plane, of normal defined as $\mathbf{n}_{MRSSp}^A = \frac{(\mathbf{A} \times \mathbf{X}) \times \mathbf{A}}{|(\mathbf{A} \times \mathbf{X}) \times \mathbf{A}|}$, always equals 0.5. The angle χ between the normal \mathbf{n}_{MRSSp}^A of the MRSS plane for the \mathbf{A} direction, and the unit normal \mathbf{u}^A to the most nearby $\{110\}$ in-zone plane of the considered slip direction \mathbf{A} , ranging in the interval $[-30^\circ, +30^\circ]$ as also shown on Figure 2, reads $\chi = \cos^{-1}(\mathbf{n}_{MRSSp}^A, \mathbf{u}^A)$. In the regularized framework of Eq. (6a) the orientation of the mean slip trace is fixed and results from solving the equation system $\max_{G \in (1,P)} (dF_m^G) = 0$ as reported in **Appendix B**. This mean equivalent slip plane is in-zone of the slip direction \mathbf{A} , with normal vector \mathbf{n}_m^{*A} , at angle $\psi = \cos^{-1}(\mathbf{n}_m^{*A}, \mathbf{u}^A)$ from the same \mathbf{u}^A reference direction $\langle 110 \rangle$. The next section reports some comparisons with experimental data in terms of slip traces orientations through the so-called $\psi(\chi)$ angular diagrams.

3.2. Mean slip traces versus load orientation from the piece-wise regularized Schmid law.

Plots of $\psi(\chi)$ angular diagrams in tension generally look like the one exemplified by dots with the simulations in the **Figures 5 a,b** from [5,7,9], for tensile tests on Fe- α and Fe-Si crystals. The domain of $\{110\}$ slip appears more extended on the side of positive χ angles. Such a more restricted domain for the activity of the $\{112\}$ AT plane indicates a higher CSS for that slip plane type than for $\{110\}$ planes. As for the elastic limit asymmetry, the so appearing asymmetry between the left and right sides of such a $\psi(\chi)$ diagram is reversed with the load sign. Owing to the difficulties to estimate the CSSs variations with load orientation and sign, the $\psi(\chi)$ diagram is certainly one of the characteristics any tentative flow criterion must fit first.

The **Figures 5 a,b** report two simulated $\psi(\chi)$ angular diagrams obtained from Eq. (6a) in the respective cases of (left) anisotropic symmetric CSSs with $\tau_0^{g'} = \tau_0^{g''} = 1.08\tau_0^g$ and (right) asymmetric CSSs with $\tau_0^{g''} = 1.15\tau_0^{g'} = 1.15\tau_0^g$. Curves are reported for several m values 10, 15, 20, 25, 100 together with the limit Schmid law solution.

These plots show two possibilities of data fitting: the first one is through a threshold asymmetry for the $\{112\}$ T and AT slip types as discussed in all what precedes. But this CSS asymmetry is no more adjustable once the matrix $[a_0]$ (and consequently $[a]$) has fully specified coefficients; a second asymmetry effect is made available through the m exponent possibly taking different values in the negative and in the positive χ domains. Namely, for the reported tensile example, the fit is better

with a m exponent larger on the hard AT side of $\{112\}$ slip than on the easy T side. Even without CSS asymmetry on the $\{112\}$ planes, when the $\{112\}$ CSS is appropriately different from the $\{110\}$ CSS (Figure 5 left), a difference in the m value between the T and AT sides of the diagram is quite enough to account for observed asymmetric diagrams without CSS asymmetry. The m exponent acts as an interaction intensity parameter between in-zone planes of the slip directions, the higher the interaction when the smaller is the parameter. This interaction intensity parameter is likely smaller (resp. larger) for the orientations where a set $AT - T - AT$ (resp. $T - AT - T$) dominates.

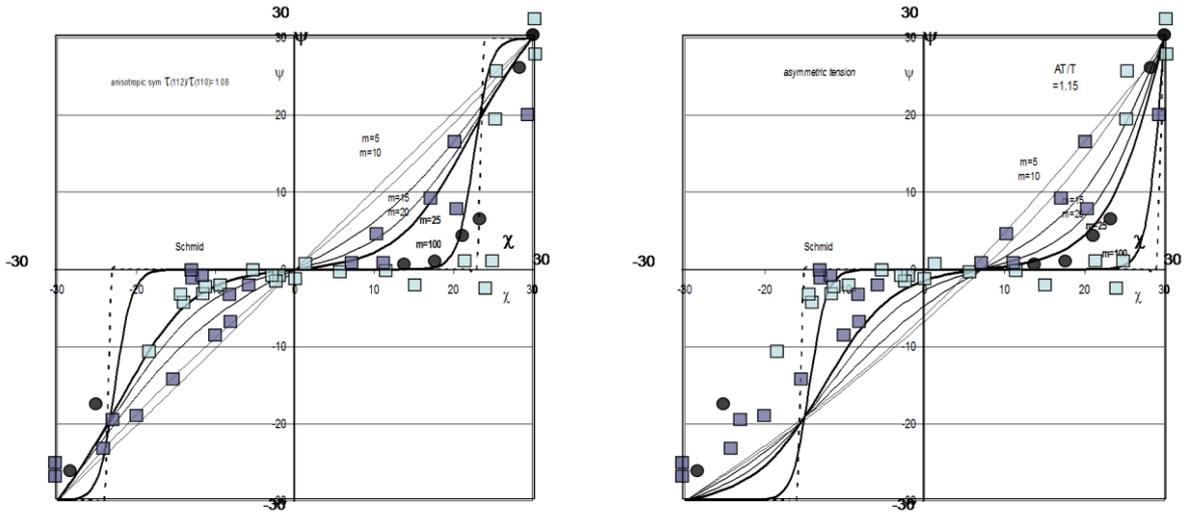


Figure 5: compared simulated $\psi(\chi)$ diagrams from the Regularized Schmid law of Eq. (6a) for (left) anisotropic symmetric CSSs with $\tau_0^{g'} = \tau_0^{g''} = 1.08\tau_0^g$ and (right) asymmetric CSSs with $\tau_0^{g''} = 1.15\tau_0^{g'} = 1.15\tau_0^g$, tension case.

The here proposed partial regularization form of the Schmid law which accounts for crossed non glide stress effects between in-zone planes still remains based on the existence of shear stress thresholds to cross an anisotropic dislocation forest that controls the plastic flow (as far as the Peierls friction is negligible [43]). This regularized form of the Schmid law also maintains a consistent formulation for both FCC and BCC structures, since the FCC structure is expected to be a particularly simple case of this more general one: in the FCC hardening stages when the dislocation core remains planar and no interactions between systems are to be considered, the criterion keeps the usual Schmid law form. In recovery stages for FCC crystals when collinear slip becomes more important (although not involving many enough collinear systems for Eq. (4) to introduce a difference compared with Eq. (1b) or (2a)), a similar collaborative slip on in-zone planes (collinear systems which go by pairs) can justify the use of Eq. (6a) as a more appropriate Schmid law form. Accounting for the primary variations discussed in section 2 is not expected to noticeably modify the simulations of the $\psi(\chi)$ diagrams of figures 5.

3.3. Remaining possible deviation or anomaly sources.

The regularized forms in Eqs (6) which group the slip planes possibly acting in coupled manner in the dislocation motion also allow to introducing extra terms if necessary. For example, in relation to the more or less fast mobility of the edge parts on the mainly screw dislocation lines one can figure out to introduce different threshold stresses for the screw and edge dislocations in the slip planes. As well if the shear stresses normal to the slip directions are to be integrated in the flow criterion [13, 14], the regularized forms of Eqs (6) can still be efficient. This would in particular open on enlarged possibilities to accounting if necessary for true deviations from the Schmid law as the reported “anomalous” behaviour, if this anomaly is confirmed.

However, this anomalous slip for BCC crystals may be less anomalous than it seems, when regarding more closely the interaction processes between non collinear slip on $\{112\}$ and $\{110\}$ planes: as pointed by Seeger and co-workers [14, 15] the anomalous slip which appears on the common $\{110\}$ (cross-slip) plane of two screw dislocation families can result from the preferably selected solution in terms of hardening level: take a load orientation in the vicinity of a $\langle 100 \rangle$ axis where slip is of higher Schmid factor on $\{112\}$ planes and consider a pair of non collinear systems to be symmetrically activated (for sake of simplicity), P and Q say (for example, close to or on a $\langle 100 \rangle$ - $\langle 110 \rangle$ zone, on the $\langle 100 \rangle$ side, as visible on figure 2 right). According to the hardening law of Eq. (1a), the incremental increases of CSSs on these two systems right after the plasticity threshold $\tau^P = \tau_c^P = \tau^Q = \tau_c^Q = \tau_0^{(112)}$ read (in the Schmid law context):

$$\begin{aligned} d(R^P \sigma) &= d\tau^P = d\tau_c^P = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_c^P} (a^{PP} d\rho^P + a^{PQ} d\rho^Q + a^{PJ} d\rho^J) \\ &= \frac{(\mu b)^2}{2\tau_0^{(112)}} (a^D d\rho^P + a^J d\rho^Q + a^{Jx} d\rho^J) = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_0^{(112)}} \left(\frac{a^D + a^J}{2} + \beta a^{Jx} \right) d\rho \end{aligned} \quad (9),$$

$$d(R^Q \sigma) = d\tau^Q = d\tau_c^Q = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_c^Q} (a^{QP} d\rho^P + a^{QQ} d\rho^Q + a^{QJ} d\rho^J) = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_0^{(112)}} \left(\frac{a^D + a^J}{2} + \beta a^{Jx} \right) d\rho,$$

with $d\rho^P \approx d\rho^Q = d\rho/2$ the primary densities, $d\rho^J = \beta d\rho$ a junction density on a third (not necessarily glissile) system, $a^{PP} = a^{QQ} = a^D$ (a dipolar coefficient), $a^{PQ} = a^{QP} = a^J$ (a junction coefficient) and $a^{PJ} = a^{QJ} = a^{Jx}$ (a second order junction coefficient⁶), while $0 < \beta < 1$. Consider a

⁶ For the interaction between a gliding dislocation and a previous (primary) junction product [30].

third slip system S with $\{110\}$ plane such that $R^S \sigma = \tau^S < \tau_c^S = \tau_0^{(110)}$ and which is (to simplify) symmetric with regard to P and Q. The CSS of this inactive system will increase by:

$$d\tau_c^S = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_c^S} (a^{SP} d\rho^P + a^{SQ} d\rho^Q + a^{SJ} d\rho^J) = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_0^{(110)}} (a^{J*} + \beta a^{Jx*}) d\rho \quad (10),$$

with $a^{SP} = a^{SQ} = a^{J*}$ and $a^{SJ} = a^{Jx*}$ a first order and a second order junction coefficient respectively. According to the Schmid law, the activation of S at the place of (P, Q) becomes

possible when $\frac{R^S \sigma}{\tau_c^S} > \frac{R^P \sigma}{\tau_c^P} = \frac{R^Q \sigma}{\tau_c^Q}$. This can be rapidly possible if the hardening of system S is

much less than the one of the systems P and Q, say, with $\tau_0^{(112)} = \alpha \tau_0^{(110)}$ and neglecting any rotation

as well as other influences, when $a^{J*} + \beta a^{Jx*} \ll \frac{1}{\alpha} \left(\frac{a^D + a^J}{2} + \beta a^{Jx} \right)$. The coefficient α is close to

unity for $\{112\}$ slip in the T direction, and between 1 and 1.15 in the AT direction. One provided explanation for the anomalous slip [14, 15] corresponds with $a^{Jx*} = 0$ because the anomalous slip plane is the common collinear system to both active ones with the favourable peculiarity of slip on it to avoid the primary created junctions if both the primary dislocation types P,Q coplanarly slip on it, as observed [16]. The condition for the activity of one (or more) system(s) like S is therefore fulfilled for a high enough a^{Jx} coefficient, what means strong obstacles for the primary active systems from early stages of slip. It is noteworthy that a similar scenario can be described for a mixed non collinear pair of systems, e.g. involving a $\{110\}$ plane with a $\{112\}$ one, when the load orientation is on the boundary between their activation zones as appears in Figure 1 right, on the $\langle 100 \rangle$ axis side. The common point for these interacting non collinear pairs is to have slip directions making an angle $\theta \approx 71^\circ$, the interaction of which is energetically not favourable⁷. This important point will be addressed in a forthcoming paper. This analysis still holds with regularized forms of the Schmid law.

4. Conclusion.

This work points out two important features of crystal plastic flow. The first one is that primary variations on the critical shear stresses between systems can result from possibly involved asymmetric slip plane types and a possibly involved high number of collinear systems. This can cause a normal variability on the Schmid flow criterion without being constitutive of a violation and

⁷ Typically, for directions A and B the Burgers vectors of the dislocations are $a[-111]/2$ and $a[111]/2$ and the pair energy is $3a^2/2$. The junction product has Burgers vector $a[022]/2$ and energy $2a^2$.

not even really of a deviation when strictly speaking. The second point is that accounting for non glide stress effect between collaborative slip systems can be represented from using an appropriately regularized form of the Schmid flow criterion. The proposed regularization for BCC crystals amounts to coupling all in-zone slip planes possibly operating for each slip direction what is the more likely interaction in that structure owing to the many collinear systems on which the dislocation cores spread. Other coupling can be added similarly if necessary. The Schmid law form is thus shown capable to integrate significant flexibility for application to a wide range of situations for crystal plastic flow without real violation of the fundamentals of that law. For non FCC crystals, a better knowledge of the dislocation interaction coefficient matrix remains a key request for further quantitative use.

Appendix A: Asymmetry details from the interaction coefficient matrix.

In our simplified context, and according to the different situations listed in Eq. (3), the total of mixed pair interactions between a $\{110\}$ plane and a $\{112\}$ plane is of 9 junction coefficients (3 triplets) and of 3 collinear coefficients. Denoting p (resp. q) the number of J' junction (resp. C' collinear) coefficients with a $\{112\}$ T plane, p (resp. q) will range from 3 to 6 (resp 1 to 2) and the number $9-p$ (resp. $3-q$) of J'' junction (resp. C'' collinear) coefficients with a $\{112\}$ AT plane will range from 6 to 3 (resp. 2 to 1). One can thus write for any line of the $\{110\}$ plane group of Table 3, with $k = |2p - 9|$, $t = |2q - 3|$ and for any partitions on p and on q as specified (say on k and on t):

$$\begin{aligned} S_{110} = S &= 2D + 2C + 8J + (qC' + (3-q)C'') + (pJ' + (9-p)J'') \\ &= 2D + 2C + 8J + 3\bar{C} + 9\bar{J} \pm (k\delta J \pm t\delta C) \end{aligned} \quad (A1),$$

where $\bar{J} = \frac{J' + J''}{2}$ and $\delta J = \frac{J'' - J'}{2}$ (resp. $\bar{C}, \delta C$). The parameter k only takes values 1 or 3, and the parameter t only value 1, with a plus or a minus sign

For the $\{110\}$ lines of the matrix it thus comes that: in case a, all the lines are equal and $p = 6$, $q = 2$ if the unique set is $T - AT - T$ or $p = 3$, $q = 1$ if it is $AT - T - AT$. This corresponds to $k = 3$, $t = 1$ with the appropriate signs; In case b, one has $p = 6$, $q = 1$ (resp. $p = 3$, $q = 2$) when the triplet of $\{110\}$ planes in-zone of the slip direction corresponding to the unique set $AT - T - AT$ (resp. $T - AT - T$) is the triplet of collinear interactions, while on all the other $\{110\}$ lines one sums two $T - AT - T$ sets with the $AT - T - AT$ one (resp. conversely) say $p = 5$, $q = 2$ (resp. $p = 4$, $q = 1$); For case c, two of the lines will correspond to $p = 5$, $q = 1$ and the two other ones to

$p = 4, q = 2$ from similar simple reasoning. These cases correspond to $k = 1, t = 1$ with the appropriate signs.

As a consequence of these various combinations, the CSSs cannot be equal for all the systems with a $\{110\}$ plane. The variations on the CSSs between the lowest and the highest cases *inside the family of $\{110\}$ planes* reach $2(3\delta J + \delta C)$ from the term in brackets in Eq. (A1).

Now considering a line of the $\{112\}$ group in the matrix, one has, whether the line being of T or of AT type, with $\bar{J}' = \frac{J'_1 + J'_2}{2}$ and $\delta J' = \frac{J'_1 - J'_2}{2}$ (resp. $\bar{J}'', \delta J''$) and the same for the collinear terms $\bar{C}', \delta C'$ (resp. $\bar{C}'', \delta C''$) while the dipolar coefficient D' (resp. D'') has no alternative.

Since the triplets of columns for the $\{112\}$ planes are the same as for the $\{110\}$ planes, one has the same three (a,b,c) cases, with the same different possibilities for the 9 junction coefficients but with not same different ones for the fourth triplet since a dipolar coefficient substitutes with a collinear one. For the remaining collinear coefficient pair aside of D' (resp. D''), the two possibilities are to either form a $AT - T - AT$ set with two coefficients C'_1 (resp. a coefficient pair (C'', C''_1)) or a $T - AT - T$ set with a coefficient pair (C', C'_1) (resp. two coefficients C''). This yields for the coefficient sum part due to the mixed triplet $D' + 2\bar{C}' + \delta C' \pm \delta C'_1$ (resp. $D'' + 2\bar{C}'' + \delta C'' \pm \delta C''_1$).

One can then write, keeping k and t for the 12 mixed interactions with a $\{110\}$ plane (which are fixed values once the $\{112\}$ matrix line is chosen) and with introducing for the $\{112\}$ - $\{112\}$ junctions interactions $p' \in [3, 6]$ and $k' = |2p' - 9|$ similarly to p and k for the lines $\{110\}$:

$$S_{(112)T} = S' = 3\bar{C} + 9\bar{J} \pm k\delta J \pm t\delta C + D' + 2\bar{C}' + \delta C' + 9\bar{J}' \pm (k'\delta J' \pm \delta C') \quad (\text{A2a}),$$

$$S_{(112)AT} = S'' = 3\bar{C} + 9\bar{J} \pm k\delta J \mp t\delta C + D'' + 2\bar{C}'' + \delta C'' + 9\bar{J}'' \pm (k'\delta J'' \pm \delta C'') \quad (\text{A2b}).$$

Not entering further the details of the differences between the coefficient sums here exemplified, Eqs (A2a) and (A2b) establish that not only the CSSs differ from one $\{112\}$ T line to a $\{112\}$ AT one but also for lines of a same T or AT type, due to the different possible values of the terms in brackets, as it is shown for the $\{110\}$ lines from Eq. (A1). Without T/AT asymmetry, all systems of a same group have a same CSS.

Appendix B: constitutive equations for a regularized Schmid law over collinear systems.

Take the crystal hardening law of the classical form $d\tau_c^g = \sum_{k=1}^N h^{gk} d\gamma^k$, resulting from the derivation of Eq. (1) in terms of the slip increments, and the so-called hardening moduli matrix $[h]$ resulting from the given laws for the variation with slip of the dislocations densities $d\rho^k(d\gamma^1, d\gamma^k, \dots, d\gamma^N)$ not to be addressed here. From the criterion form of Eq. (6a), the consistency conditions for flow read:

$$dF^G = d \left(\left(\sum_{g=1}^{N(G)} \left(\frac{\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{R}^g}{\tau_c^g} \right)^m \right)^{\frac{1}{m}} - 1 \right) = \sum_{g=1}^{N(G)} \left(\frac{\tau_c^g}{\tau_c^g} \right)^{m-1} d \left(\frac{\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{R}^g}{\tau_c^g} \right) = (\mathbf{F}^G, \boldsymbol{\Sigma}) d\boldsymbol{\Sigma} + \sum_{k=1}^N (\mathbf{F}^G, \gamma^k) d\gamma^k = 0 \quad (\text{B1}).$$

We treat the case of a fully applied stress tensor, strain and mixed conditions have been discussed in

[35, 36]. With $P_m^g = \left(\frac{\tau_c^g}{\tau_c^g} \right)^{m-1} \frac{1}{\tau_c^g}$ and $\tilde{H}_\Sigma^{gk} = h^{gk} \left(\frac{\tau_c^g}{\tau_c^g} \right) - (\mathbf{R}^g, \gamma^k) : \boldsymbol{\Sigma}$, the partial derivatives read:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^G, \boldsymbol{\Sigma} &= \sum_{g=1}^{N(G)} \left(\frac{\tau_c^g}{\tau_c^g} \right)^{m-1} \left(\frac{\tau_c^g}{\tau_c^g}, \boldsymbol{\Sigma} \right) = \sum_{g=1}^{N(G)} \left(\frac{\tau_c^g}{\tau_c^g} \right)^{m-1} \frac{\mathbf{R}^g}{\tau_c^g} = \sum_{g=1}^{N(G)} P_m^g \mathbf{R}^g = \mathbf{N}_m^G \quad \text{with } P_m^g = \left(\frac{\tau_c^g}{\tau_c^g} \right)^{m-1} \frac{1}{\tau_c^g} \\ \mathbf{F}^G, \gamma^k &= \sum_{g=1}^{N(G)} \left(\frac{\tau_c^g}{\tau_c^g} \right)^{m-1} \left(\frac{\tau_c^g}{\tau_c^g}, \gamma^k \right) = - \sum_{g=1}^{N(G)} P_m^g \tilde{H}_\Sigma^{gk} \quad \text{with } \tilde{H}_\Sigma^{gk} = h^{gk} \left(\frac{\tau_c^g}{\tau_c^g} \right) - (\mathbf{R}^g, \gamma^k) : \boldsymbol{\Sigma}. \end{aligned}$$

With the block matrix form $H_\Sigma^{GK} = \sum_{k=1}^{N(K)} \sum_{g=1}^{N(G)} P_m^g \tilde{H}_\Sigma^{gk} P_m^k$ and the plastic multipliers $d\lambda_m^K$ such that $d\gamma^k = (\mathbf{F}^K, \tau^k) d\lambda_m^K = P_m^k d\lambda_m^K$, the system to solve (of dimension at most P the number of slip directions in the crystal structure) can be written:

$$\mathbf{N}_m^G : d\boldsymbol{\Sigma} = \sum_{k=1}^N \sum_{g=1}^{N(G)} P_m^g \tilde{H}_\Sigma^{gk} d\gamma^k = \sum_K \left(\sum_{k=1}^{N(K)} \sum_{g=1}^{N(G)} P_m^g \tilde{H}_\Sigma^{gk} d\gamma^k \right) = \sum_K \left(\sum_{k=1}^{N(K)} \sum_{g=1}^{N(G)} P_m^g \tilde{H}_\Sigma^{gk} P_m^k \right) d\lambda_m^K = \sum_K H_{m,\Sigma}^{GK} d\lambda_m^K,$$

such that $d\lambda_m^K = \sum_G (H_{m,\Sigma}^{KG})^{-1} (\mathbf{N}_m^G : d\boldsymbol{\Sigma})$. The plastic strain increment follows as $d\boldsymbol{\varepsilon}^P = \sum_{k=1}^N \mathbf{R}^k d\gamma^k =$

$$\sum_K \left(\sum_{k=1}^{N(K)} \mathbf{R}^k P_m^k \right) d\lambda_m^K = \sum_K \left(\sum_{k=1}^{N(K)} \{ \mathbf{m}^k \otimes \mathbf{n}^k \} P_m^k \right) d\lambda_m^K.$$

But since for each slip direction K the systems have the same vector $\mathbf{m}^k = \mathbf{m}^K$, the strain increment

simplifies as $d\boldsymbol{\varepsilon}^P = \sum_K \left\{ \mathbf{m}^K \otimes \sum_{k=1}^{N(K)} \mathbf{n}^k P_m^k \right\} d\lambda_m^K = \sum_K \left\{ \mathbf{m}^K \otimes \mathbf{n}_m^{*K} \right\} P_m^{*K} d\lambda_m^K$. The unit vectors \mathbf{n}_m^{*K} are the

current normal vector to a mean slip plane related to each K slip direction, equivalent to the set of the possibly collaborative collinear systems. Their directions vary with the exponent m through the terms P_m^k corresponding to each collinear set.

For a single active slip direction \mathbf{A} , one has:

$$d\boldsymbol{\varepsilon}^P = \left\{ \mathbf{m}^A \otimes \sum_{k=1}^{N(A)} \mathbf{n}^k P_m^k \right\} d\lambda_m^A = \left\{ \mathbf{m}^A \otimes \mathbf{n}_m^{*A} \right\} P_m^{*A} d\lambda_m^A, \quad d\lambda_m^A = \frac{\mathbf{N}_m^A : d\boldsymbol{\Sigma}}{\mathbf{H}_{m,\Sigma}^{AA}}, \quad \mathbf{H}_{m,\Sigma}^{AA} = \sum_{k=1}^{N(A)} \sum_{g=1}^{N(A)} P_m^g \tilde{\mathbf{H}}_\Sigma^{gk} P_m^k \quad (\text{B2}).$$

In the case of the fully regularized form of Eq. (6b), the unique consistency condition and the related partial derivatives (assuming $n \geq m$) read:

$$dF_{n,m} = d \left(\left(\sum_{G=1}^P \left(\sum_{g(G)=1}^{N(G)} \left(\frac{\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{R}^{g(G)}}{\tau_c^{g(G)}} \right)^m \right)^{\frac{n}{m}} \right)^{\frac{1}{n}} - 1 \right) = \sum_{G=1}^P \sum_{g(G)=1}^{N(G)} \left(\left(\sum_{h(G)=1}^{N(G)} \left(\frac{\tau^{h(G)}}{\tau_c^{h(G)}} \right)^m \right)^{\frac{n-1}{m}} \right) \left(\frac{\tau^{g(G)}}{\tau_c^{g(G)}} \right)^{m-1} d \left(\frac{\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{R}^{g(G)}}{\tau_c^{g(G)}} \right) = 0$$

,

$$F_{n,m}, \boldsymbol{\Sigma} = \sum_{G=1}^P \sum_{g(G)=1}^{N(G)} \left(\left(\sum_{h(G)=1}^{N(G)} \left(\frac{\tau^{h(G)}}{\tau_c^{h(G)}} \right)^m \right)^{\frac{n-1}{m}} \right) \left(\frac{\tau^{g(G)}}{\tau_c^{g(G)}} \right)^{m-1} \frac{\mathbf{R}^{g(G)}}{\tau_c^{g(G)}} = \sum_G \sum_{g(G)} P_{n,m}^{g(G)} \mathbf{R}^{g(G)} = \mathbf{N}_{n,m},$$

$$F_{n,m}, \gamma^{k(K)} = \sum_{G=1}^P \sum_{g(G)=1}^{N(G)} \left(\left(\sum_{h(G)=1}^{N(G)} \left(\frac{\tau^{h(G)}}{\tau_c^{h(G)}} \right)^m \right)^{\frac{n-1}{m}} \right) \left(\frac{\tau^{g(G)}}{\tau_c^{g(G)}} \right)^{m-1} \left(\frac{\tau^{g(G)}}{\tau_c^{g(G)}}, \gamma^{k(K)} \right) = - \sum_G \sum_{g(G)} P_{n,m}^{g(G)} \tilde{\mathbf{H}}_\Sigma^{g(G)k(K)}.$$

Here we have $\tilde{\mathbf{H}}_\Sigma^{g(G)k(K)} = \mathbf{h}^{g(G)k(K)} \left(\frac{\tau^{g(G)}}{\tau_c^{g(G)}} \right) - \left(\mathbf{R}^{g(G)}, \gamma^{k(K)} \right) : \boldsymbol{\Sigma}$ and:

$$P_{n,m}^{g(G)} = \left(\left(\sum_{h(G)=1}^{N(G)} \left(\frac{\tau^{h(G)}}{\tau_c^{h(G)}} \right)^m \right)^{\frac{n-1}{m}} \right) \left(\frac{\tau^{g(G)}}{\tau_c^{g(G)}} \right)^{m-1} \frac{1}{\tau_c^{g(G)}} = T_{n,m}^{(G)} \left(\frac{\tau^{g(G)}}{\tau_c^{g(G)}} \right)^{m-1} \frac{1}{\tau_c^{g(G)}} = T_{n,m}^{(G)} P_m^{g(G)},$$

The difference with the regularized form of Eq. (8b) comes from the newly appearing coefficients $T_{n,m}^{(G)}$ which all reduce to unity when $m = n$. For a fully applied stress tensor, the solution obeys

$$d\gamma^{k(K)} = (\mathbf{F}, \tau^{k(K)}) d\lambda_{n,m} = T_{n,m}^{(K)} P_m^{k(K)} d\lambda_{n,m} \quad \text{with} \quad \mathbf{H}_{n,m,\Sigma} = \sum_G \sum_K \left(\sum_{g(G)k(K)} P_m^{g(G)} \tilde{\mathbf{H}}_\Sigma^{g(G)k(K)} P_m^{k(K)} \right) T_{n,m}^{(K)} T_{n,m}^{(G)} \quad \text{in}$$

$d\lambda_{n,m} = \frac{\mathbf{N}_{n,m} : d\boldsymbol{\Sigma}}{\mathbf{H}_{n,m,\Sigma}}$. The plastic strain increment reads:

$$d\boldsymbol{\varepsilon}^P = \sum_{K=1}^P \sum_{k(K)=1}^{N(K)} \mathbf{R}^{k(K)} d\gamma^{k(K)} = \sum_{K=1}^P \left(\sum_{k(K)=1}^{N(K)} \mathbf{R}^{k(K)} P_m^{k(K)} \right) T_{n,m}^{(K)} d\lambda_{n,m} = \sum_{K=1}^P \left\{ \mathbf{m}^K \otimes \left(\sum_{k(K)=1}^{N(K)} \mathbf{n}^{k(K)} P_m^{k(K)} \right) T_{n,m}^{(K)} \right\} d\lambda_{n,m}$$

where the equivalent mean slip planes have unit normals $\mathbf{n}_{n,m}^{*K}$ such that

$$\left(\sum_{k(K)=1}^{N(K)} \mathbf{n}^{k(K)} P_m^{k(K)} \right) T_{n,m}^{(K)} = \mathbf{n}_{n,m}^{*K} P_{n,m}^{*K}.$$

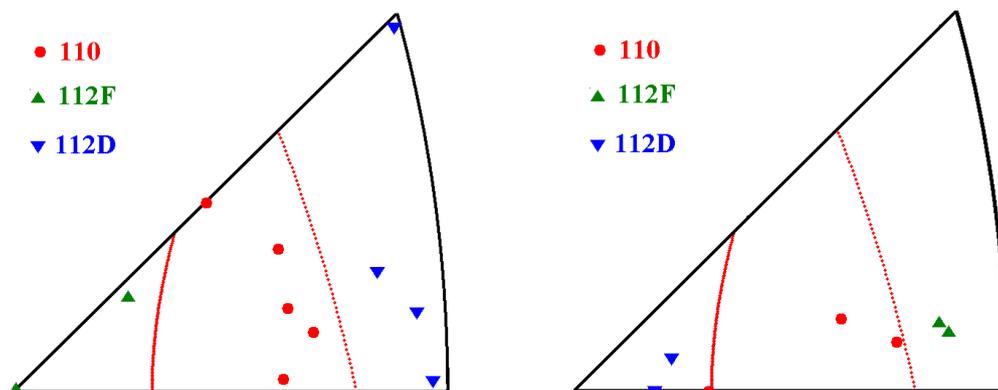
References

- [1] Boas W., Schmid E., 1933. *Z. Physik*, **86** (11-12), 828-830.
- [2] Taylor G., Elam C., 1926. *Proc. R. Soc. London, A* **112** (761), 337-361.
- [3] Opinsky A. J., Smoluchowski R., 1951. *J. Appl. Phys.*, **22**, 1380-1384.
- [4] Jaoul B., Gonzalez D., 1961. *J. Mech. Phys. Solids*, **9** (1), 16-38.
- [5] Sestak B., Zarubova N., 1965. *Phys. Stat. Sol. B*, **10** (1), 239-250.
- [6] Nakada Y., Key A., 1966. *Acta Metall.*, **14** (8), 961-972.
- [7] Takeuchi S., Furubayashi E., Taoka T., 1967. *Acta Metall.*, **15** (7), 1179-1191.
- [8] Takeuchi T., 1969. *Japan J. Appl. Phys.*, **8**, 320-328.
- [9] Franciosi P., 1983. *Acta Metall.*, **31**, 1331-1342.
- [10] Seeger A., Hollang L., 2000. *Mat. Trans., JIM*, **41**, 141-151.
- [11] Kim J., Jang D., Greer J., 2010. *Acta Mater.*, **58**, 2355-2363.
- [12] Vitek V., Mrovec M., Bassani J., 2004. *Mat. Sci. Eng. A* **365**, 31-37.
- [13] Vitek V., Mrovec M., Gröger R., Bassani J., Racherla V., Yin L., 2004. *Mat. Sci. Eng. A* **387-389**, 138-142.
- [14] Seeger A., 2001. *Mat. Sci. Eng. A* **319-321**, 254-260.
- [15] Seeger A., Wasserbach W., 2002. *Phys. Stat. Solidi A* **189** (1), 27-50.
- [16] Hsiung L., 2010. *Mat. Sci. Eng. A* **528**, 329-337.
- [17] Frederiksen S.L, Jacobsen K.W., 2003. *Phil. Mag.*, **83**, 365-375.
- [18] Cai W., Bulatov V., Chang J., Li J., Yip S., 2004. in *Dislocations in Solids*, Nabarro & Hirth Ed **12**, 73-106.
- [19] Itakura M., Kaburaki H., Yamagushi M., 2012. *Acta Mater.*, **60**, 3698-3710.
- [20] Chang J., Cai W., Bulatov V., Yip S., 2001. *Mat. Sci. Eng., A* **309-310**, 160-163.
- [21] Ventelon L., Willaime F., Leyronnas P., 2009. *J. Nucl. Mat.*, **386-388**, 26-29.
- [22] Kubin L., Hoc T., Devincere B., 2009. *Acta Mater.* **57**, 2567-2575.
- [23] Mecif A., Bacroix B., Franciosi P., 1997. *Acta Mater.*, **45** (1), 371-381.
- [24] Peirce D., Asaro R.J., Needleman A., 1983. *Acta Mater.*, **31** (12), 1951-1967.
- [25] Kocks U.F., Franciosi P., Kawai M., 1991. *Texture & Microstruct.*, **14-18**, 1103-1114.
- [26] Franciosi P., Stout M.G., O'Rourke J., Erskine, B., Kocks U.F., 1987. *Acta Metall.*, **35** (8) 2115-2128.
- [27] Tranchant F., Vergnol J., Franciosi P., 1993. *Acta Metall. Mater.*, **41** (5), 1531-1541.
- [28] Franciosi P., Zaoui A., 1982. *Acta Metall.*, **30**, 2141-2151.
- [29] Bulatov V., Hsiung L., Tang M., Arsenlis A., Bartelt M., Cai W., Florando J., Hiratani M., Rhee M., Hommes G., Pierce T., de la Rubia T., 2006. *Nature letters*, **440**, 1174-1178.
- [30] Madec R., Kubin L., 2008. *Scripta Mater.* **58**, 767-770.

- [31] Franciosi P., 1988. *Rev. Phys. Appl.*, **23** (4), 383-394
- [32] Madec R., Kubin L. P., 2004. *Proc. Iutam symp. Solid mechanics and applications*, **115**, 69-78.
- [33] Monnet G., Terentyev D., 2009. *Acta Mater.*, **57** (5), 1416-1426.
- [34] Queyreau S., Monnet G., Devincere B., 2009. *Int. J. Plasticity*, **25**, 361-377.
- [35] Hoc T., Devincere B., Kubin L., 2004. *Proc. 25th RISO Int. Symp.*, Eds Gundlach, 43-59.
- [36] Franciosi P., Berbenni S., 2007. *J. Mech. Phys. Solids*, **55** (11), 2265-2299.
- [37] Franciosi P., Berbenni S., 2008. *Int. J. Plasticity*, **24**, 1549-1580.
- [38] Gambin W., 1991. *Eng. Trans.* **39** (3/4), 303-324.
- [39] Arminjon M., 1991. *Texture & Microstruct.*, **14-18**, 1121-1128.
- [40] Darrieulat M., Piot D., 1996. *Int. J. Plasticity*, **12** (5), 575-610.
- [41] Franciosi P., Zaoui, A. 1991. *Int. J. Plasticity* **7**, 295-311.
- [42] Petryk H., 2005. *Phil. Trans. R. Soc. A*, **363**, 2479-2515
- [43] Wang G., Strachan A., Cagin T., Goddard III W., 2004. *Model. Simul. Mater. Sci.* **12**, S371-S389.

CHAPITRE IV – ANALYSE DES RESULTATS EXPERIMENTAUX MEB SUR MONOCRISTAUX FE ALPHA

Les orientations des monocristaux sont rassemblées dans la **figure IV.1**. La densité de dislocations initiale mesurée par technique de diffraction X sur quelques échantillons est de l'ordre de $3.6 \cdot 10^{13} m^{-2}$. Les parties **IV.1**, **IV.2** et **IV.3** rassemblent respectivement les résultats de traction et de compression obtenus in situ en Microscopie Electronique à Balayage pour des orientations sollicitant de manière principale un plan (110), (112) dans le sens facile (F) et (112) dans le sens difficile (D). Les situations de glissement multiple, homogènes ou non, vis-à-vis de ces mêmes plans sont rapportées dans la partie correspondante. Les résultats complémentaires issus des observations AFM sont rassemblés au **chapitre V**. La partie **IV.4** reprend en simulations numériques les comportements homogènes types observés, sur les bases de modélisations reportées au **chapitre I** et résumées ici en précisant les particularités introduites. Les principaux résultats dégagés sont synthétisés en dernière partie du chapitre.



*Figure IV.1 : Toutes les orientations des monocristaux de fer alpha :
Gauche – traction et Droite - compression*

IV.1. Orientations de glissement sur plans (110).

Nous reportons deux essais de traction homogène types pour des orientations au centre du triangle de référence, un essai de traction symétrique instable hétérogène sur la zone $\langle 001 \rangle \langle -111 \rangle$ et trois essais de compression homogène d'orientations situées dans la partie médiane du triangle de référence également, essais pour lesquels un plan (110) subit la cission résolue la plus élevée et s'avère actif en glissement simple globalement ou localement (cas hétérogène).

Pour chaque essai sont rapportés :

- un tableau récapitulatif de l'orientation cristalline et des systèmes les plus sollicités (la fiche identité du monocristal) ;
- une série de micrographies à différentes étapes de la déformation plastique d'abord caractérisée par la rotation de l'axe de sollicitation suivie par technique EBSD ;
- l'évolution de la rotation du cristal, par le suivi EBSD des orientations de l'axe de sollicitation et des normales aux faces principale et latérale ;
- la courbe contrainte-déformation ;
- une ou plusieurs courbe cission-glissement selon le mode de glissement (homogène simple, homogène multiple, hétérogène) observé ou selon les modes compatibles à l'observation en cas d'ambiguïté.

Traction (110) essai 1: axe de traction initial $\langle -4 \ 13 \ 23 \rangle$, normale à la surface $\langle -14 \ 22 \ -15 \rangle$.

m	n	Facteur de Schmid	Angle de trace sur la surface	Facteur de visibilité
$\langle 1 \ 1 \ 1 \rangle$	$[-1 \ 0 \ 1]$	0.494	45	0.13
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$	$[1 \ 0 \ 1]$	0.435	137	0.4
$\langle 1 \ 1 \ 1 \rangle$	$[-2 \ 1 \ 1]$	0.465	50	0.13

Tableau IV.1 : Systèmes de glissement de plus grands facteurs de Schmid, traction 110 -1

Les observations sont rapportées **Figures IV-2 à IV-5**.

L'état de surface de l'éprouvette n'est pas de bonne qualité. Les traces de glissement observées sont relativement rectilignes, et proches de la trace théorique du plan (110) le plus sollicité.

Cependant, le coefficient de visibilité très faible et l'orientation du plan (112) D voisin, de second facteur de Schmid proche, laisse à ce stade le glissement observé compatible avec un glissement colinéaire sur ces 2 plans. Le glissement induit une rotation de l'axe de traction vers la direction de glissement du système le plus sollicité, jusqu'à traverser la zone de symétrie $\langle 001 \rangle \langle -011 \rangle$ sans

manifester de changement qui indiquerait l'activation de la direction de glissement opposée. Ce glissement mono-directionnel, avec éventuellement une part de glissement colinéaire (112)D, se poursuit jusqu'à striction vers 40% de déformation. Le glissement secondaire ne se manifeste qu'à l'approche de la striction. L'aspect de la striction malheureusement mal orientée par rapport à l'observation ne permet pas de dire si la surface de pré-rupture est plane ou ondulée dans le sens travers (le vecteur de Burgers est très penché sur la surface).

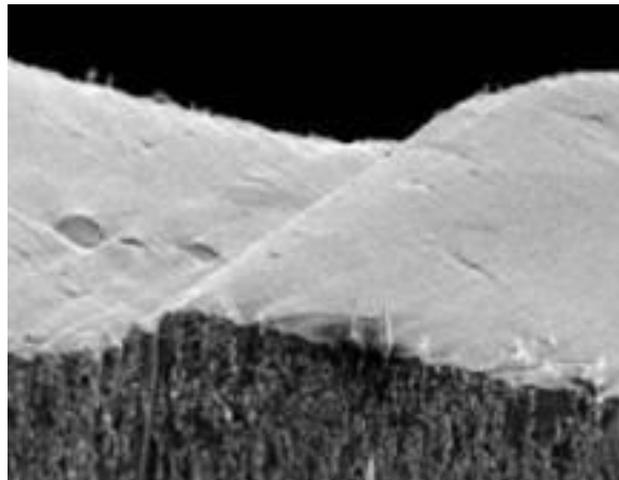


Figure IV.2 : Striction en glissement simple de l'éprouvette de traction 110 – 1

L'important overshoot observé **figure IV-3** (traversée de la zone de symétrie $\langle 001 \rangle - \langle 011 \rangle$), qui indique que l'activation du système non colinéaire de plan (110) voisin reste impossible bien que la cission critique devienne dominante sur lui est pleinement conforme aux observations anciennes de Jaoul et Gonzalez [JAO 1961] qui souligne que le glissement secondaire n'apparaît qu'à la rupture finale. Ce point important qui suggère un écrouissage fortement anisotrope entre systèmes de plans (110) à directions de glissement différentes, sera discuté ultérieurement.

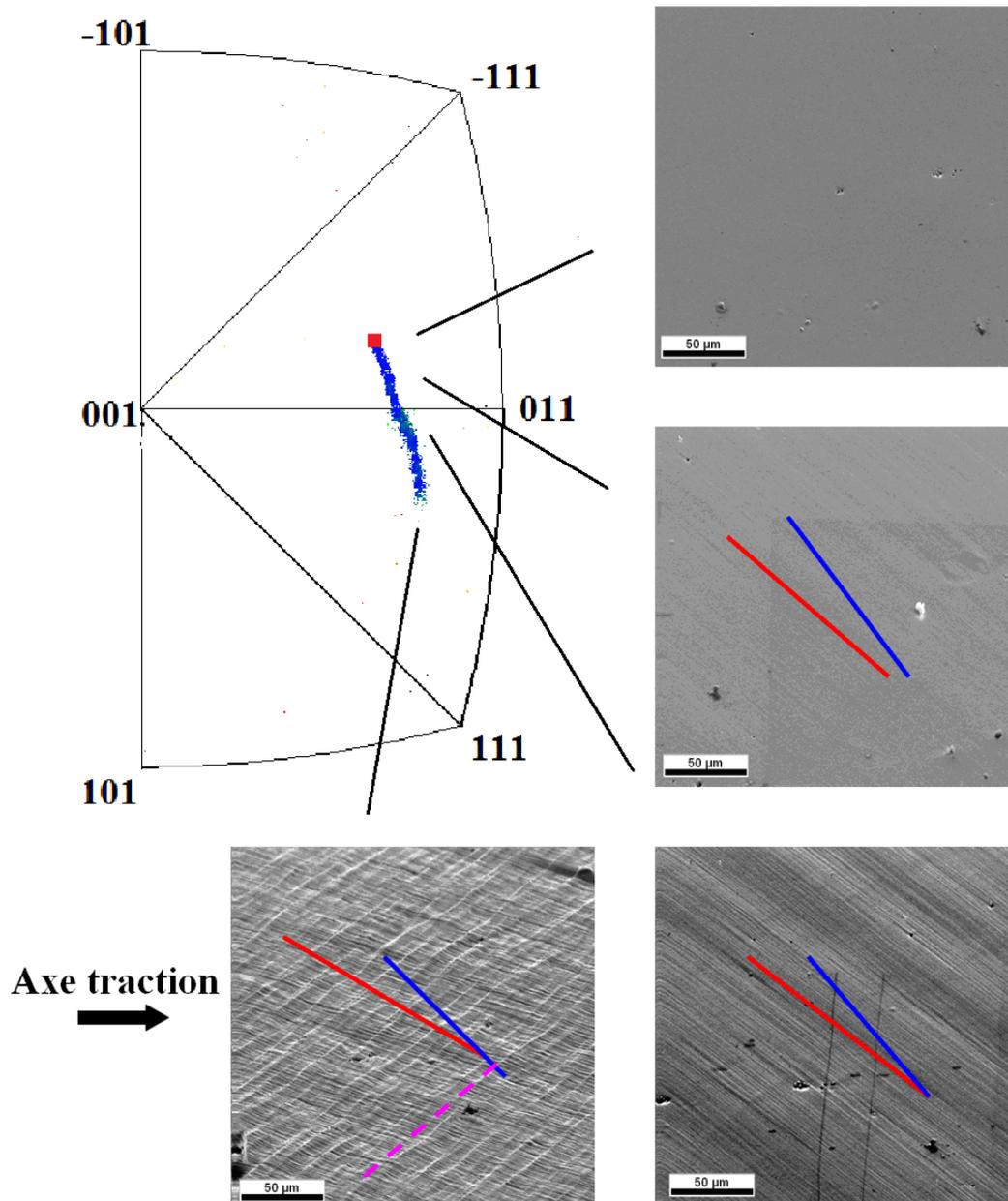


Figure IV.3 : Système de glissement principale « ligne rouge » $\langle 111 \rangle [-101]$, On ne voit pas activation de système « $\langle -111 \rangle [101]$ (tiret violet) quand l'axe de traction passe le bord du triangle standard mais seulement à l'approche de la rupture de l'éprouvette. Les spots de mesure EBSD restent à peu près d'étalement constant, signe d'une déformation dont l'homogénéité reste stable.

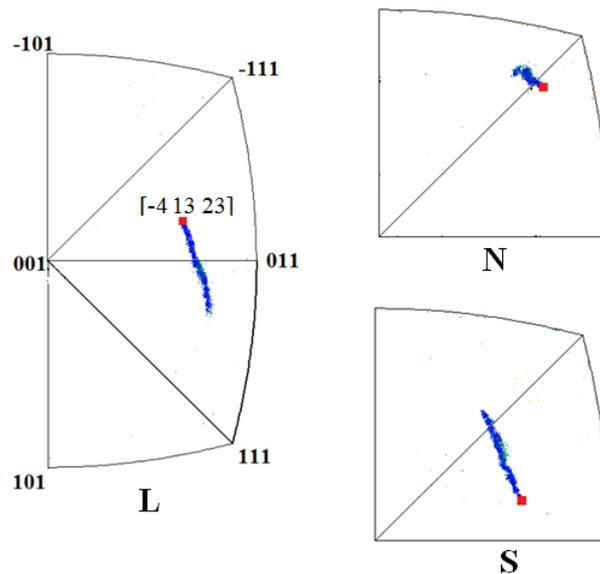


Figure IV.4 : Les rotations mesurées par rapport aux trois axes de l'éprouvette (traction 110 - 1).
L : axe de traction, N : normale à la surface, S : normale latérale.

Les courbes de traction obtenues pour cette orientation et des orientations proches sont très reproductibles. On ne constate pas de transition **stade I** – **stade II** marquée bien que le glissement simple initial soit avéré par les traces de glissement et la rotation de réseau. Ceci provient de la densité de dislocation élevée de nos monocristaux, et pour une part également de la petite dimension des sections d'éprouvettes. Nous y reviendrons.

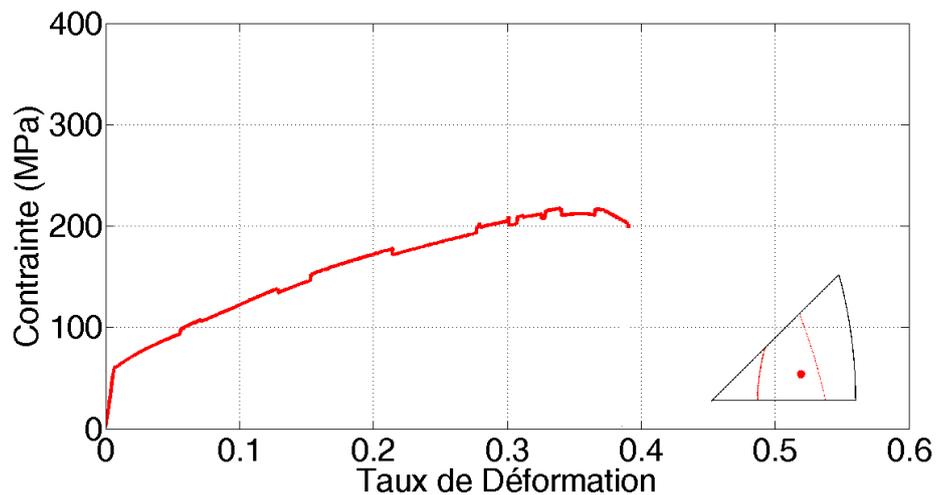


Figure IV.5a : Courbe contrainte – déformation du essai 110-1

Si on suppose que le facteur de Schmid change linéairement entre les pas de scan EBSD, et si le glissement est simple, on peut tracer la courbe cission-glissement correspondant :

$$\tau = \sigma(\varepsilon)R(\varepsilon)$$

$$\Delta\gamma = \Delta\varepsilon / R(\varepsilon)$$

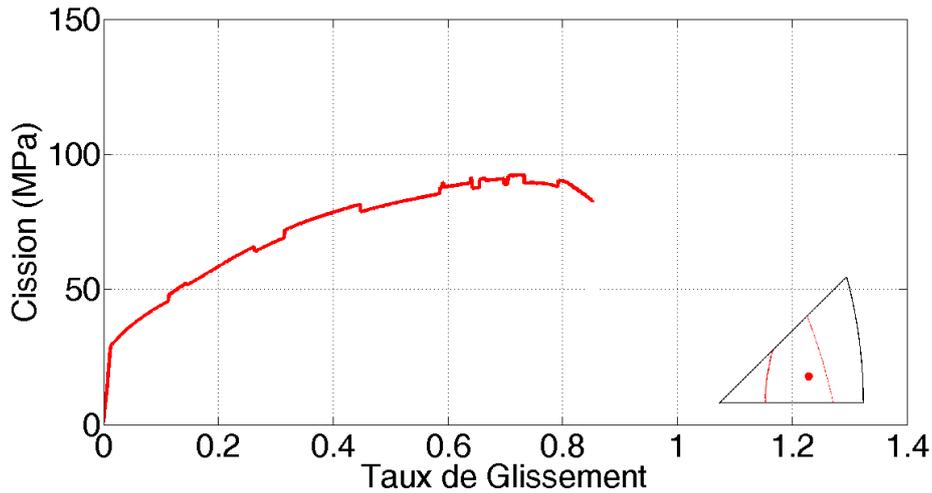


Figure IV.5b : Courbe cission-glissement, traction 110 -1

On peut aussi calculer le taux d'écrouissage moyen $\langle H \rangle = (\tau_s - \tau_c) / \gamma_s$ où τ_s est la valeur cission de saturation, τ_c est la valeur cission critique, γ_s est la valeur glissement à saturation.

Ici, $\langle H \rangle_{110-1} = 80 \text{ MPa}$ environ. Si le taux d'écrouissage décroît linéairement avec la cission $H(\tau) = H_{\max} (\tau_s - \tau) / (\tau_s - \tau_c)$ alors $H_{\max} = 160 \text{ MPa}$ soit $H_{\max} = \mu / 500$ (μ est le module de cisaillement, pour le Fer alpha on prend $\mu = 84 \text{ GPa}$).

La valeur de H_{\max} est plus grande que pour un stade I usuel (de l'ordre de $\mu / 2000$) mais reste plus petit que pour le **stade II** ($\mu / 200$ env). [AKI 1976] explique un tel écrouissage par la pureté du matériau, qui est ici de niveau commercial.

Dans la référence Jaoul et Gonzalez, il est indiqué que lorsque l'axe de traction est initialement sur la zone $\langle 001 \rangle - \langle 011 \rangle$ il est possible d'observer l'activation des deux systèmes, mais que un petit écart suffit à enclencher un glissement simple qui dure longtemps. Nous avons pu vérifier ce résultat, sur l'éprouvette n°2, orientés pour du glissement (110) coin mais très proche d'une sollicitation identique des 2 systèmes voisins.

Traction (110) essai 2 : axe de traction initial $\langle -1\ 11\ 21 \rangle$, normale à la surface $\langle 1\ 0\ 0 \rangle$

m	n	Facteur de Schmid	Angle de trace sur la surface	Facteur de visibilité
$\langle 1\ 1\ 1 \rangle$	$[-1\ 0\ 1]$	0.49	118	0.58
$\langle -1\ 1\ 1 \rangle$	$[1\ 0\ 1]$	0.486	118	0.58

Tableau IV.2 : Systèmes de glissement le plus grands facteurs de Schmid, traction 110 - 2

Les observations sont rapportées **Figures IV-6 à IV-8**.

Dans ce cas le coefficient de visibilité est élevé pour les 2 systèmes de plans (110) et l'orientation accentue l'écart de cission critique avec les plans (112) D colinéaires à ces systèmes. La rotation est clairement vers la direction de glissement du système de plus grand facteur de Schmid même si l'écart entre les deux est très faible et quasiment dans le domaine de la précision d'orientation (2°). Cela confirme que le glissement (112)D n'est pas aussi facile à activer que le glissement (110).

D'après la normale, le plan de grande face est un plan (100).

Les systèmes homologues (de plan (110) et de plan (112)D) de part et d'autre de la zone de symétrie $\langle 001 \rangle$ - $\langle 011 \rangle$ ont donc des traces parallèles. Compte tenu de la position de l'axe de traction, les 2 plans (110) auront une trace à peu près symétrique de la trace des 2 plans (112)D, à $\pm (45^\circ/2)$ environ. Sur la face latérale de l'éprouvette ils auront des traces symétriques à $\pm 45^\circ$ environ. Les micrographies sont conformes à cette analyse.

Sur la vue globale d'éprouvette en état de striction, il semble n'y avoir qu'une trace de glissement dominante sur la face frontale, sans qu'il soit possible de distinguer sur la face latérale si un ou deux plans sont actifs. La trace de la striction ne semble pas suivre le plan principal mais elle se produit dans une zone proche de l'attache de l'éprouvette dans les mors, zone où l'état de contrainte peut s'éloigner de l'état de traction uniaxiale.

Les courbes contrainte-déformation et cission-glissement peuvent être tracé de même manière qu'essai 110-1

Le taux d'érouissage moyen $\langle H \rangle_{110-2} = 68$ MPa est proche de la valeur dans l'essai traction

110-1, ce qui confirme un glissement simple probable. Ce résultat est en accord avec le résultat dans la référence **[JAO 1961]** : même pour un axe de traction quasiment sur la zone $\langle 001 \rangle$ - $\langle 011 \rangle$, on a très peu de chance d'avoir un glissement double (110).

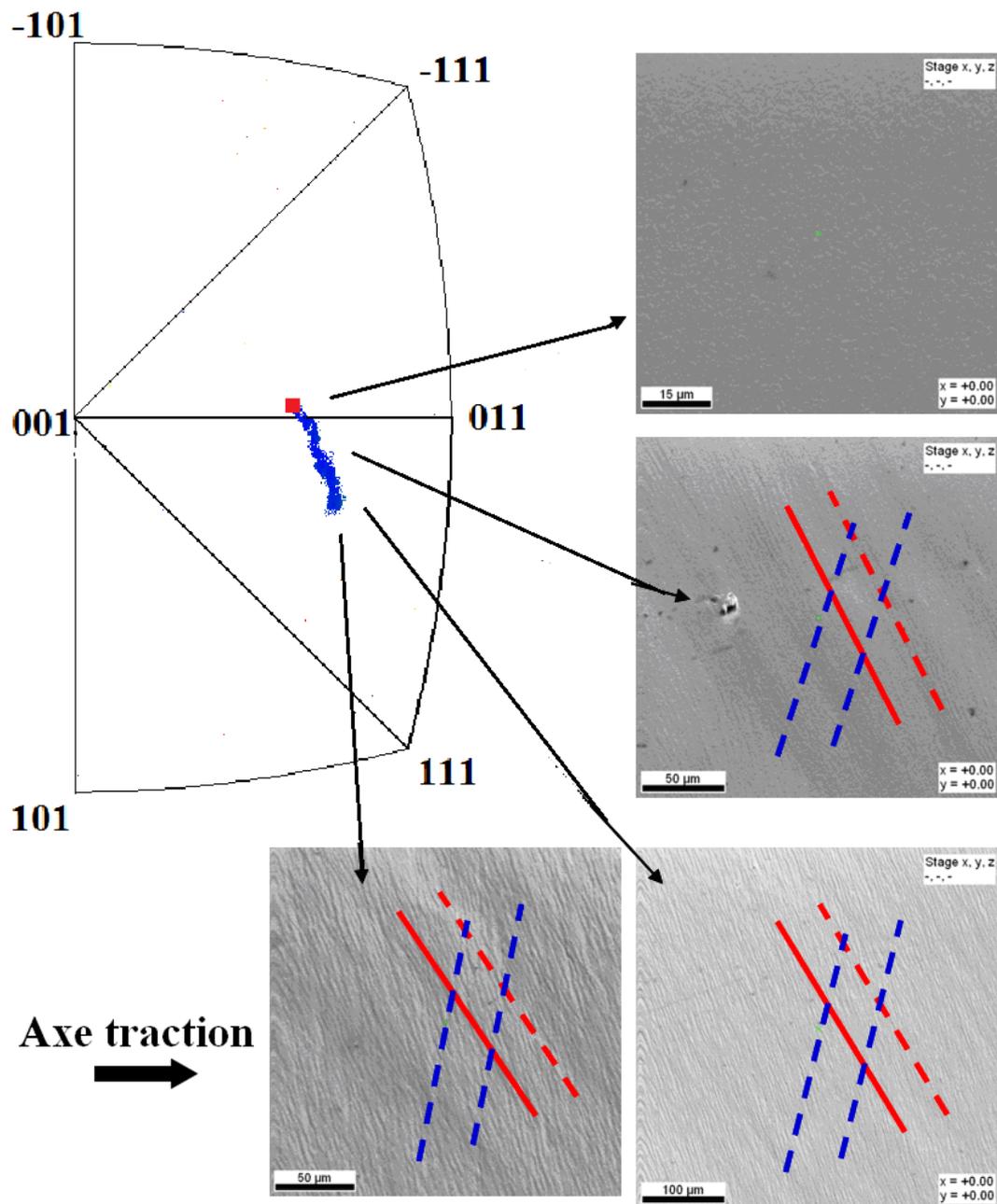


Figure IV.6 : Système de glissement principal « ligne rouge » $\langle 1\ 1\ 1 \rangle [-1\ 0\ 1]$, Facteur de Schmid initial par rapport à système de glissement 110 du triangle du bas « tiret rouge » $\langle 1\ 1\ 1 \rangle [1\ 0\ 1]$ $R1/R2 = 1.01$, et par rapport du système 112D à côté : « tiret bleu » $\langle 1\ 1\ 1 \rangle [-2\ 1\ 1]$ $R1/R3 = 1.12$ et $\langle -1\ 1\ 1 \rangle [2\ 1\ 1]$: $R1/R4 = 1.19$

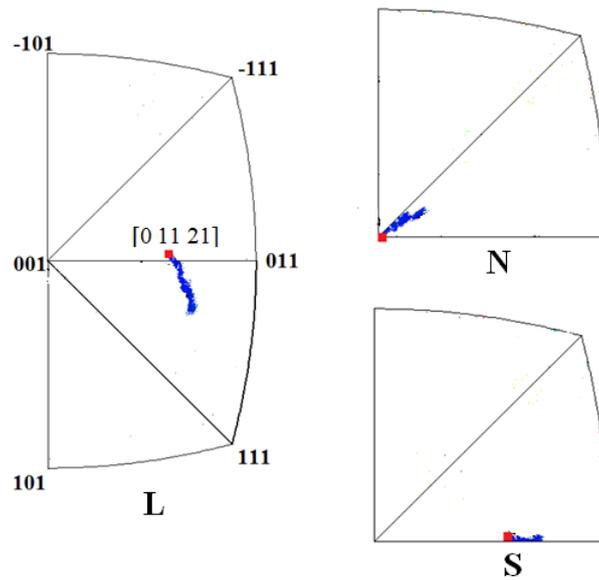


Figure IV.7 : Les rotations mesurées par rapport aux trois axes de l'éprouvette (traction 110 - 2)

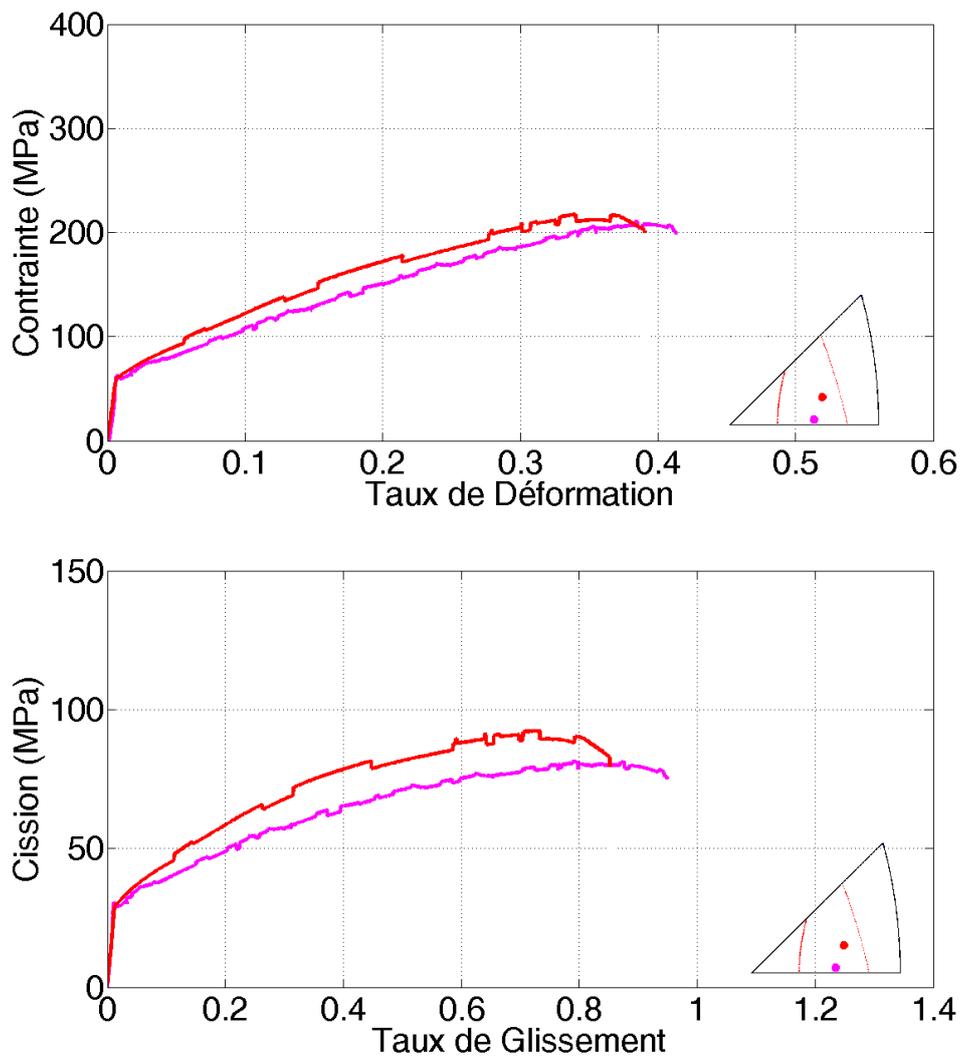


Figure IV.8 : Courbes contrainte -déformation et cission-glissement, traction 110 - 2

Traction (110) essai 3 : axe de traction initial $\langle -9\ 9\ 23 \rangle$, normale à la surface $\langle -13\ 15\ -11 \rangle$

m	n	Facteur de Schmid	Angle de trace sur la surface	Facteur de visibilité
1 1 1	-1 0 1	0.4348	120	0.23
<i>-1 -1 1</i>	<i>0 1 1</i>	<i>0.4348</i>	<i>60</i>	<i>0.33</i>

Tableau IV.3 : Systèmes de glissement le plus grands facteurs de Schmid, traction 110 – 3

Les observations sont reportées **Figures IV-9 à IV-11**.

Cette orientation sur la zone de symétrie $\langle 001 \rangle \langle -111 \rangle$ est un exemple de traction symétrique instable avec déformation hétérogène. Les 2 systèmes de même facteur de Schmid sont actifs séparément dans des zones différentes de cristal. La rotation cristalline dans une zone ne diffère pas de la rotation de glissement simple pour ce qui est de l'axe de traction mais s'en éloigne davantage pour les 2 autres normales de faces d'éprouvettes.

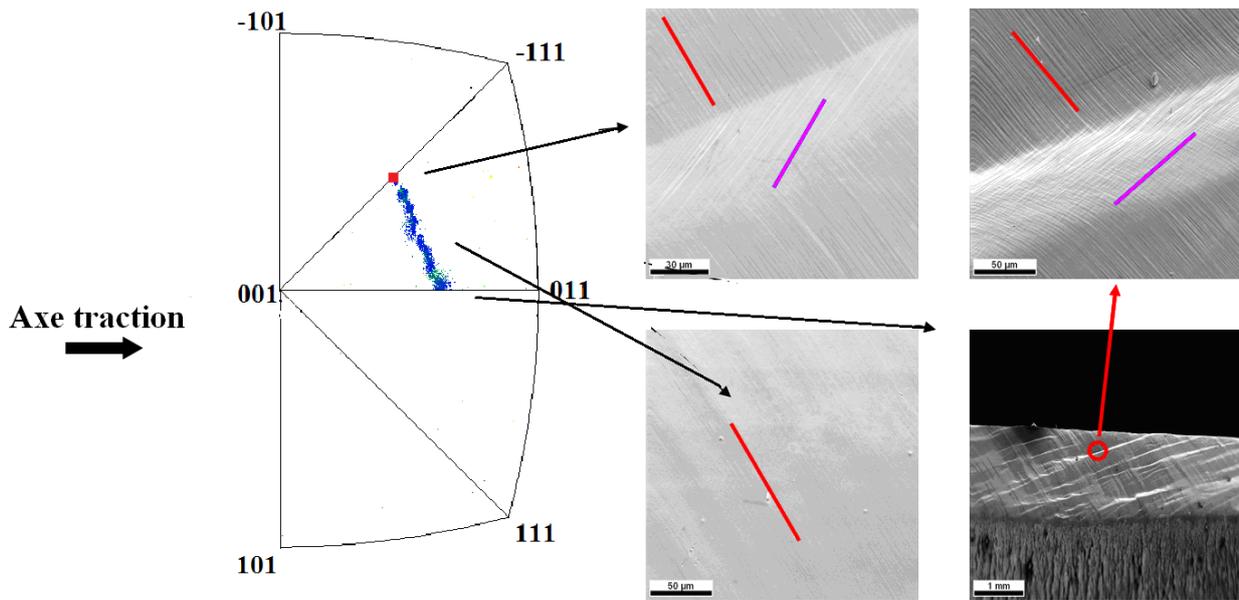


Figure IV.9 : Système de glissement principal « ligne rouge » $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$ $[-1\ 0\ 1]$, facteur de visibilité $k=0.23$. Système de glissement 110 local symétrique « ligne bleu » $\langle -1\ -1\ 1 \rangle$ $[0\ 1\ 1]$, facteur de visibilité $k=0.33$

Jaoul et Gonzalez [JAO 1961], rapportent l'observation que lorsque l'axe de traction est initialement sur la zone $\langle 001 \rangle \langle -111 \rangle$ il est possible d'observer des bandes locales de l'activation des deux systèmes qui ne se superposent pas. Nous la retrouvons dans cet essai.

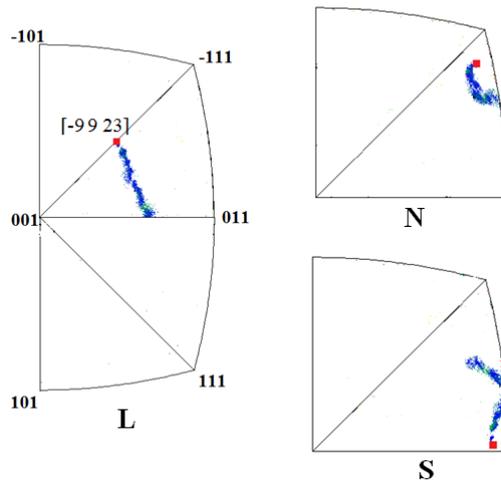


Figure IV.10 : Les rotations mesurées par rapport aux trois axes de l'éprouvette (traction 110 - 3)

On notera sur les micrographies que les traces de glissement (110) observées dans chaque zone sont très rectilignes. Et chaque système de glissement a une zone activé différente, il est très difficile pour un système de glissement de traverser l'autre. La rotation de l'axe de traction n'est pas stable et ressemble localement à une rotation de glissement simple.

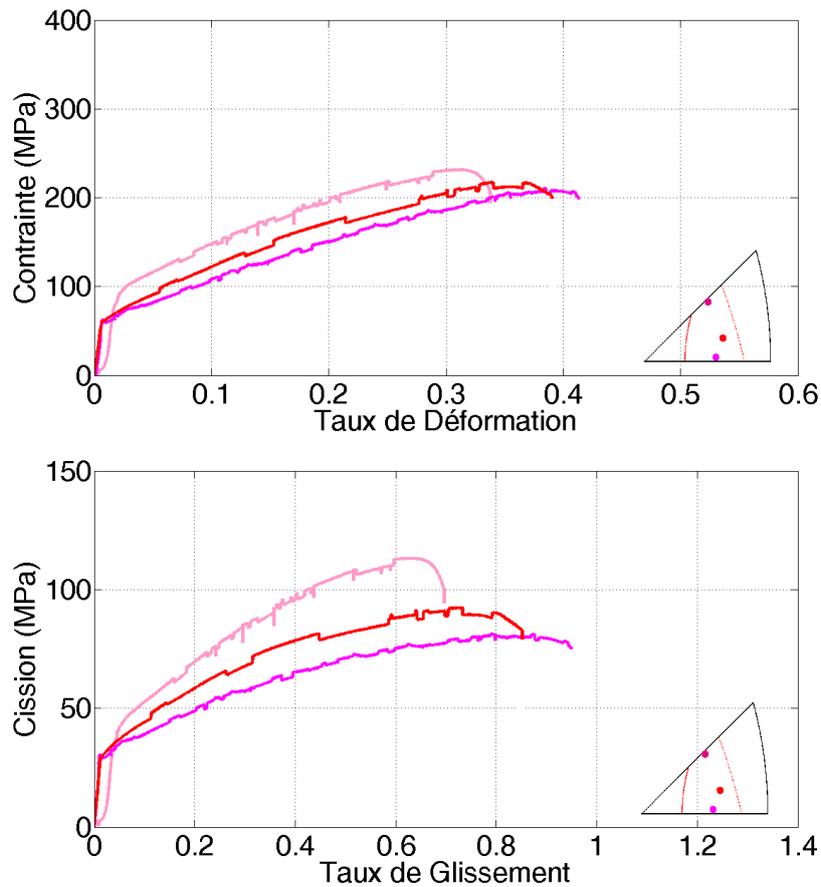


Figure IV.11 : Courbes contrainte –déformation et cission-glissement, traction 110-3.

La courbe cission-glissement est tracée avec l'hypothèse glissement double initial mais très rapidement cette hypothèse est en défaut (avec la rotation) et le comportement change vers celui de glissement simple : un système de glissement prend le rôle dominant et le deuxième système de glissement s'arrête.

Le taux d'écroutissement moyen $\langle H \rangle_{110-3} = 130\text{MPa}$, est cependant beaucoup plus grand que lors des essais de traction (110)-1 et (110)-2. Avec $H_{\text{max}} = \mu/300$ environ, on a un taux d'écroutissement de type stade II qui est en accord avec l'observation de glissement double initialement. Le glissement simple ultérieur n'est pas associé à une baisse du taux d'écroutissement. On verra par la suite que ce comportement provient d'un libre parcours réduit par la forte sollicitation initiale de 2 systèmes.

Compression (110) essai 1: axe de compression <-2 11 16>, normale à la surface <-7 -19 12>

m	n	Facteur de Schmid	Angle de trace sur la surface	Facteur de visibilité
1 1 1	-1 0 1	0.4830	53	0.34
<i>1 1 1</i>	<i>-2 1 1</i>	<i>0.4787</i>	<i>40.8</i>	<i>0.34</i>

Tableau IV.4 : Systèmes de glissement de plus grands facteurs de Schmid

Les observations sont reportées **Figure IV-12 à IV-14**.

La rotation de l'axe de compression se fait vers la normale au plan de glissement. Dans cet essai la rotation se fait en effet plutôt vers une direction <110> (sur la **figure IV-12**, la direction symétrique à <-101> par rapport à la zone <001>-<-111>). Si le système actif était le système de plan (112)D le plus sollicité en second, la rotation serait vers la direction <-211> (au dessus de la direction <-111> sur la figure) ce qui n'est pas le cas observé.

Les courbes contrainte-déformation et cission-glissement peuvent être tracé de la même manière que dans l'essai de traction 110-1 qui est d'orientation voisine, en supposant un glissement simple.

La **figure IV-14** reporte ensembles les courbes de cet essai de compression et les courbes de l'essai de traction n°1.

Les formes des deux courbes traction et compression sont similaires, on peut donc dire que le comportement mécanique est le même que celui en traction.

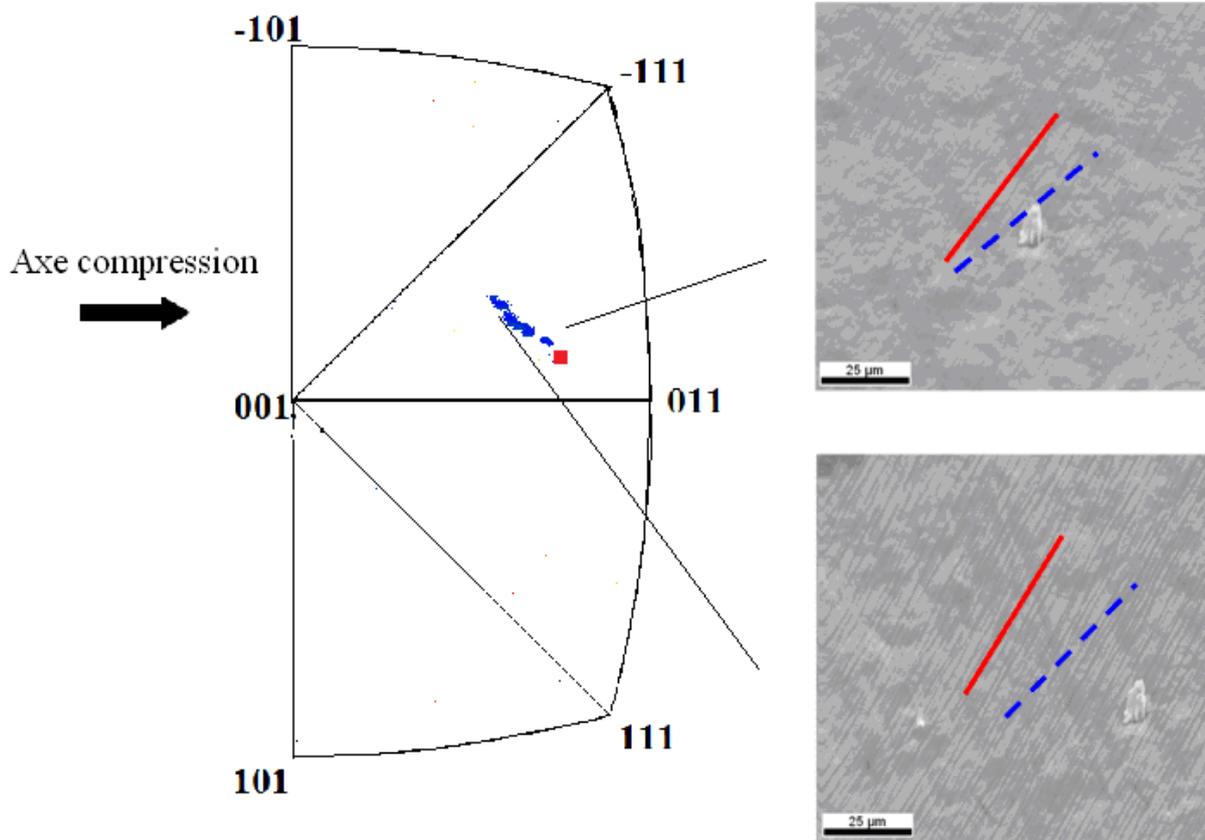


Figure IV.12 : Système de glissement principe $(-101)\langle 111 \rangle$ « tiret rouge »

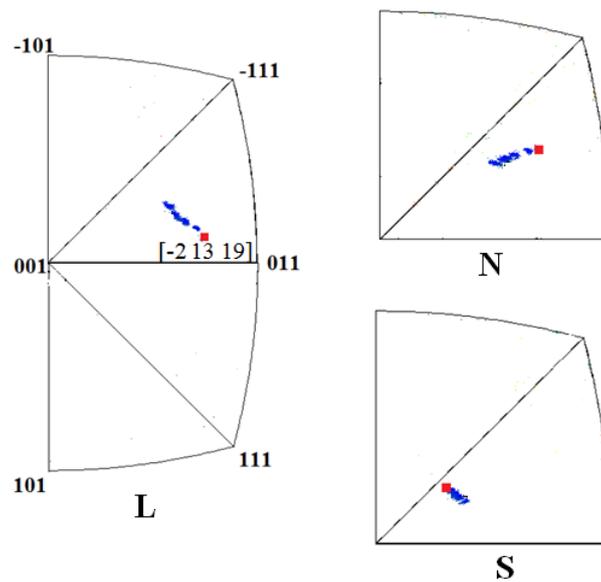


Figure IV.13 : Les rotations mesurées par rapport aux trois axes de l'éprouvette (compression 110 - 1).

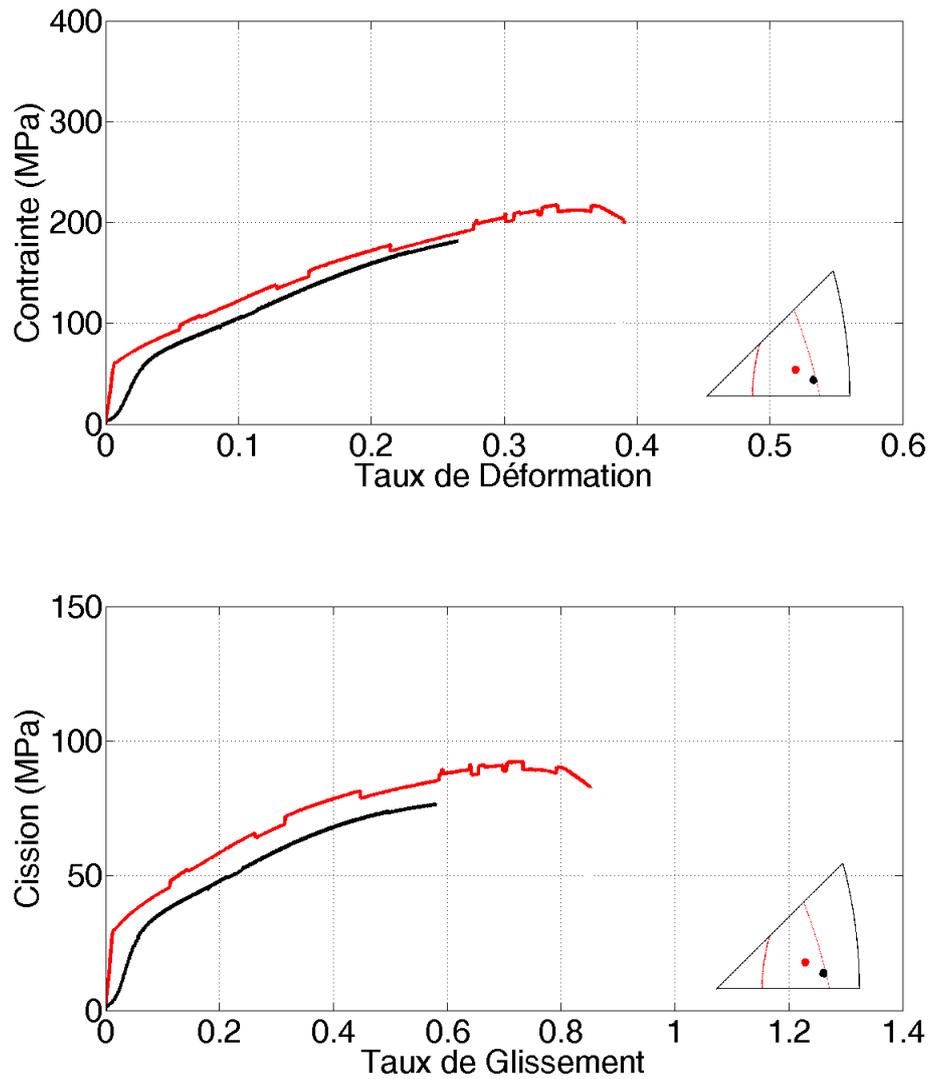


Figure IV.14 : Courbes contrainte –déformation et cission-glissement : traction (rouge)-compression (noir)

Compression (110) essai 2: axe de compression $\langle 0 \ 5 \ 19 \rangle$, normale à la surface $\langle -19 \ 3 \ -1 \rangle$

m	n	Facteur de Schmid	Angle de trace sur la surface	Facteur de visibilité
1 1 1	-1 0 1	0.4833	67	0.51
-1 1 1	1 0 1	0.4811	85	0.63
-1 -1 1	0 1 1	0.3607	120	0.45
-1 1 1	2 1 1	0.4824	52	0.51
1 1 1	-2 1 1	0.4847	50	0.63

Tableau IV.5 : Systèmes de glissement le plus grands facteurs de Schmid compression 110 - 2

Les observations sont reportées **Figures IV-15 à IV-17**.

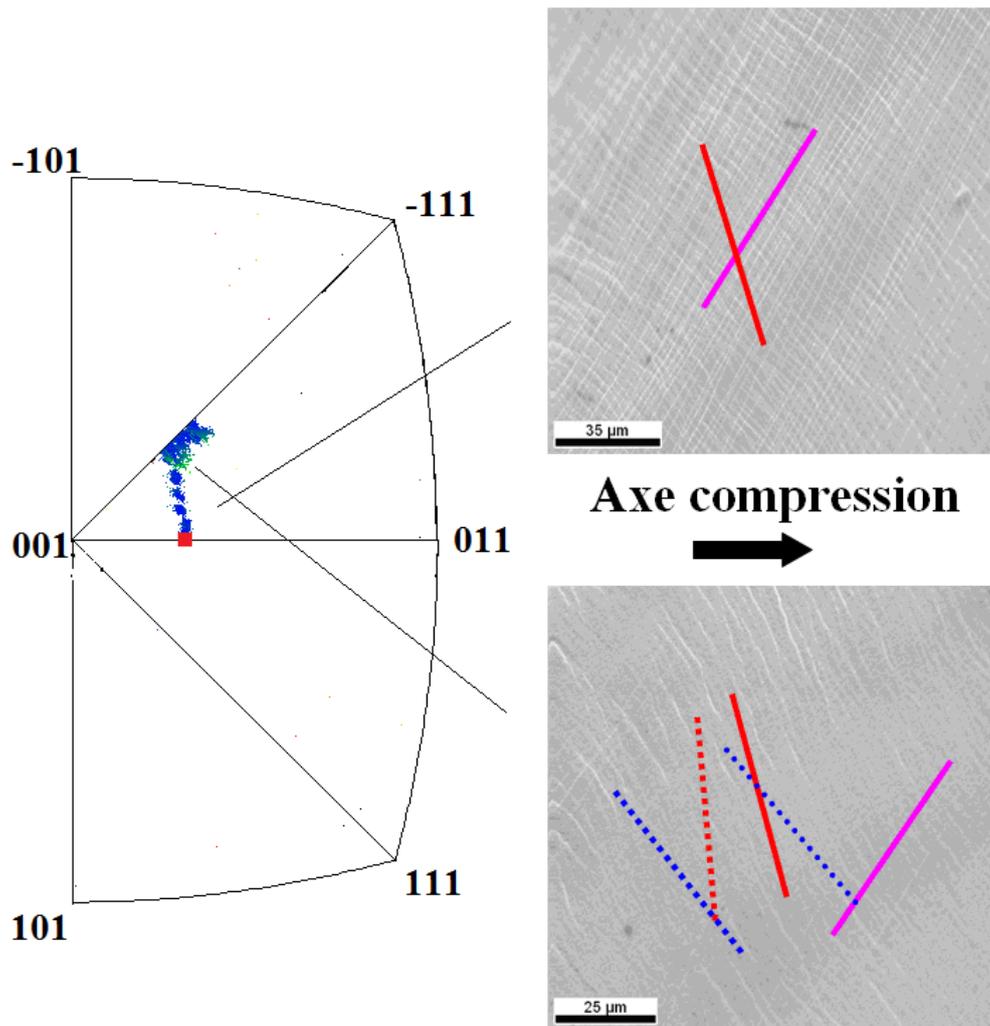


Figure IV.15 : Système de glissement principal $(-101)\langle 111 \rangle$ « ligne rouge » et glissement secondaire $(011)\langle -1-11 \rangle$ « ligne violet ». En pointillés, les traces des autres systèmes de facteurs de Schmid venant ensuite par ordre décroissant de valeur.

Cette orientation est dans la zone où on peut activer : soit le système de glissement $\langle 111 \rangle (-101)$, soit le système de glissement $\langle 111 \rangle (-211)$. Les facteurs de Schmid de 4 systèmes favorables sont très proches. C'est la zone instable avec les systèmes de glissement (110) et stable avec les systèmes de glissement $(112D)$ en compression.

D'abord on a un glissement simple, les traces ne sont pas très rectilignes, et puis quand l'axe de traction atteint la zone $\langle 001 \rangle - \langle -111 \rangle$, on a un glissement double sur les deux systèmes de plans (110) symétriques. La trace du second système reste plus rectiligne alors que les traces primaires sont davantage sinueuses, ce qui indique une activité plus importante du système secondaire. La rotation n'indique pas d'overshoot en arrivant sur la zone $\langle 001 \rangle - \langle -111 \rangle$ ce qui indiquerait que l'interaction entre ces 2 systèmes non colinéaires de plans (110) n'est pas très fortes (cissions critiques égales bien que l'un ait été fortement déformé et l'autre pas). Ce résultat diffère du fort

overshoot observé en traction sur la zone $\langle 001 \rangle - \langle 011 \rangle$ et qui impliquait également 2 systèmes non colinéaires et de plans (110). On notera qu'une différence entre les zones $\langle 001 \rangle - \langle -111 \rangle$ et $\langle 001 \rangle - \langle 011 \rangle$ est que la paire de directions de glissement concernées font dans le premier cas un angle de 109° (obtus) et de 71° (aigu) dans le second cas. Ainsi qu'indiqué au **chapitre I (section I.3b)**, les jonctions sont favorables pour l'angle obtus et défavorable pour l'angle aigu, ce qui peut expliquer une difficulté moindre pour activer le second système en compression sur la zone $\langle 001 \rangle - \langle -111 \rangle$ qu'en traction sur la zone $\langle 001 \rangle - \langle 011 \rangle$.

On pourra comparer ce comportement à la soi-disant « anomalie » ou « violation » de la loi de Schmid évoquée au chapitre III, dont une explication compatible avec le cadre de la loi de Schmid suppose une forte interaction pour un angle de 71° entre les directions de glissement.

Ce comportement en compression diffère également du comportement hétérogène en traction sur cette même zone $\langle 001 \rangle - \langle -111 \rangle$. Cette différence s'explique plus classiquement par un changement de stabilité lorsque l'on inverse le signe d'une sollicitation : le comportement en compression correspond à un glissement double stable sur la zone $\langle 001 \rangle - \langle -111 \rangle$.

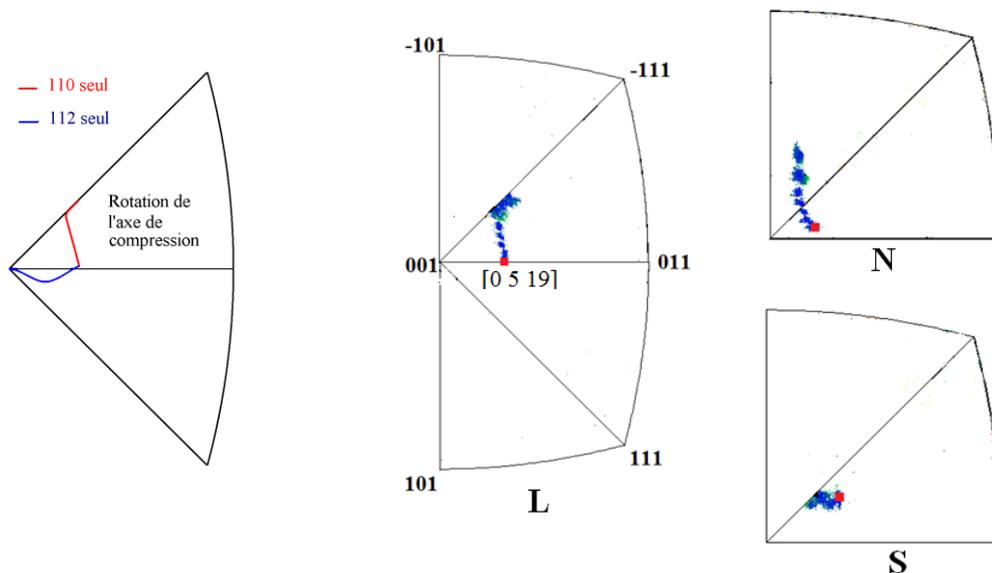


Figure IV.16 : Les rotations mesurées par rapport aux trois axes de l'éprouvette (compression 110 - 3) et simulation de glissement simple sur plan (110) en rouge ou sur plan (112) en bleu

La courbe contrainte-déformation de cet essai (courbe couleur bronze **figure IV-17.a**) ne diffère pas beaucoup de la précédente dans sa première partie mais on constate bien une transition à un taux de déformation approchant les 10%, correspondant à l'approche de la zone $\langle 001 \rangle - \langle -111 \rangle$.

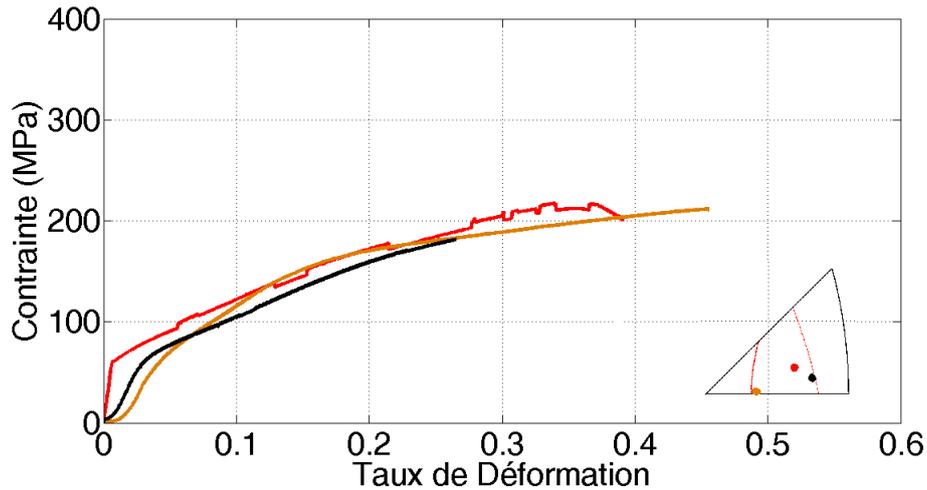


Figure IV.17.a : Courbes contrainte–déformation de 2 essais compression, 1 traction (ligne rouge).

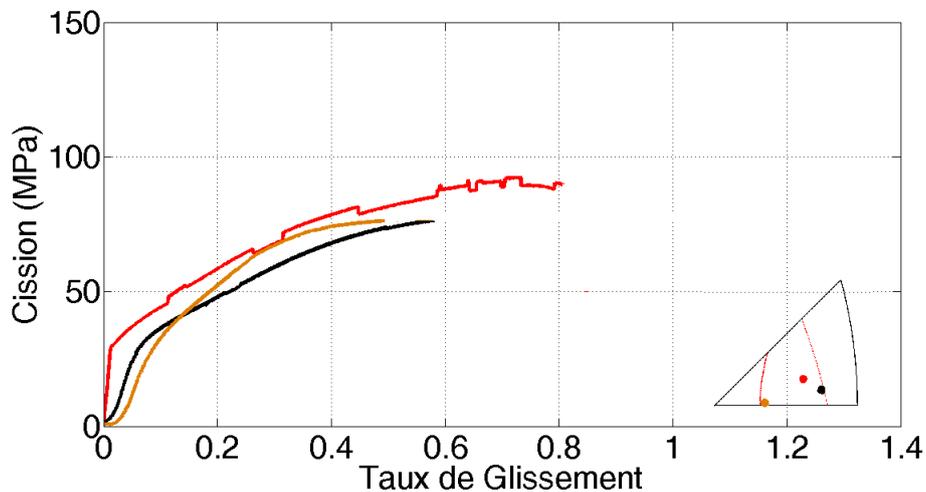


Figure IV.17.b : Courbes cission-glissement simple de 2 essais compression, 1 traction (rouge).

Les courbes cission-glissement ont été tracées **figure IV-17.b** avec l’hypothèse de glissement simple, hypothèse qui est correcte jusqu’à 10-20% de la déformation environ. La courbe couleur bronze correspond à cette hypothèse dont on voit bien qu’elle est d’abord comparable à l’essai de compression 110-1 mais devient incorrecte au-delà de la première partie. La transition de glissement simple à glissement double n’est pas simple d’analyse. A supposer que le glissement devient progressivement double symétrique on peut extraire une estimation de l’interaction avec le système secondaire, mais ceci sera plus efficacement fait par des simulations numériques appuyées sur une modélisation complètes, telles que présentées en partie **IV.4**.

On retiendra de cette comparaison traction – compression en glissement de plans (110) qu’il n’apparaît de pas dissymétrie de comportement associée à un renversement de signe de la sollicitation.

IV.2. Orientations de glissement sur plans (112) sens facile (F).

On reporte deux essais de traction types et un essai de compression type pour lesquels le glissement actif est de type (112) en sens facile (F).

Traction (112)F, essai 1: axe de traction initial $\langle -5\ 6\ 27 \rangle$, normale à la surface $\langle -14\ 15\ -6 \rangle$

m	n	Facteur de Schmid	Angle de trace sur la surface	Facteur de visibilité
$\langle -1\ 1\ 1 \rangle$	$[1\ -1\ 2]$	0.4875	90	0.62
$\langle 1\ 1\ 1 \rangle$	$[1\ 1\ -2]$	0.4428	52	0.15
$\langle 1\ 1\ 1 \rangle$	$[-1\ 0\ 1]$	0.4630	57	0.15
$\langle -1\ -1\ 1 \rangle$	$[0\ 1\ 1]$	0.4434	120	0.18

Tableau IV.6 : Système de glissement le plus grande facteur de Schmid, traction 112F - 1

Les observations sont reportées **Figures IV-18 à IV-20**.

Un test de sollicitation en traction de l'activation éventuelle d'un système de plan (112) en sens facile se fait dans une zone proche d'un axe $\langle 001 \rangle$. Lorsque l'on se situe proche de la zone symétrique $\langle 001 \rangle \langle -111 \rangle$ comme c'est le cas de l'orientation reportée, le plan (112)F ne se distingue pas du plan de cisaillement maximum pour la même direction de glissement. La rotation sera dans les 2 cas vers la direction de glissement $\langle -111 \rangle$, le long de la zone $\langle 001 \rangle \langle -111 \rangle$.

L'information incontestable qui en résulte est que le glissement n'est pas sur les plans (110) de plus grand facteur de Schmid qui sont 4B et 1C pour cette orientation proche de $\langle 001 \rangle$ vers $\langle -111 \rangle$ (direction A), de directions respectives de glissement $\langle 111 \rangle$ et $\langle -1-11 \rangle$. L'activation simultanée et équilibrée de ces deux systèmes induirait une rotation vers $\langle 001 \rangle$. Donc, soit le glissement est sur le plan (112)F, soit il suit le plan de cisaillement maximum en tant que tel, et dans les 2 options la loi de Schmid (activation du système de plus forte cission résolue) s'applique. Mais si le glissement résulte d'un glissement double (non colinéaire) sur des plans (110), la loi de Schmid serait en défaut.

Les traces de glissement observées sont très sinueuses, sans qu'il soit possible de préciser les plans impliqués par ces sinuosités. S'il s'agit de glissement dévié pour les dislocations vis, on s'attend à la participation des plans de zones immédiatement voisins du plan (112)F le plus sollicité. Ces plans, on vient de le souligner ne sont pas ceux de facteur de Schmid les plus élevés parmi les systèmes de plans (110) mais les systèmes 3A et 2A.

On note aussi que la rotation se poursuit au-delà de la zone dans laquelle les systèmes de plan (110) voisins deviennent prépondérants en facteur de Schmid, encore une indication d'une anisotropie d'écrouissage forte entre systèmes de directions de glissement différentes (et à angles aigus) mais

aussi de plans de glissement différents dans ce cas : un glissement primaire (112) en sens facile rend difficile l'activation secondaire de glissements non colinéaires au primaires et sur des plans (110) dont la direction de glissement fait un angle aigu (71°) avec la direction primaire.

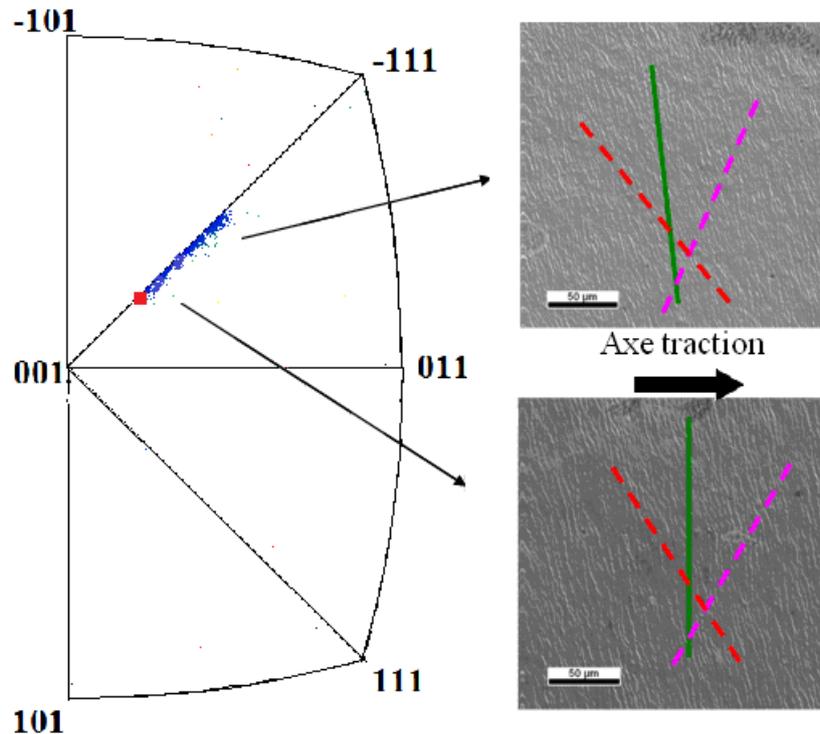


Figure IV.18 : Système de glissement principale 112F « ligne verte » $\langle -1\ 1\ 1 \rangle [1\ -1\ 2]$, Facteur de Schmid initial par rapport à 2 systèmes de glissement 110 symétrique du triangle « tiret rose » $\langle 1\ 1\ 1 \rangle [-1\ 0\ 1]$, « tiret rouge » $\langle -1\ -1\ 1 \rangle [0\ 1\ 1]$: $R1/R2 = 1.05$, facteur de visibilité de 2 systèmes 110 : $k=0.17$

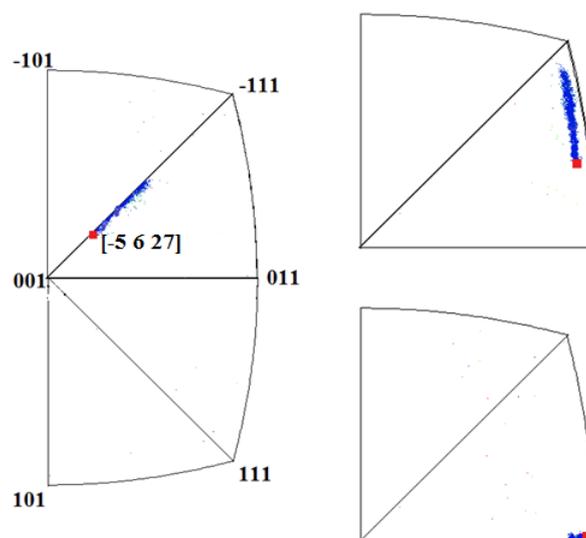


Figure IV.19 : Les rotations mesurées par rapport aux trois axes de l'éprouvette (traction 112F - 1).

La courbe contrainte déformation est significativement plus faible que pour les cas d'activation d'un plan (110), alors que les facteurs de Schmid principaux sont en général proche de 0,46 – 0,49 et on remarque également que la pente est plus constante, ce qui n'est pas du à une variation plus faible du facteur de Schmid avec la rotation dans ce cas. La courbe cission-glissement, tracée avec l'hypothèse de glissement simple est sensiblement plus linéaire qu'en glissement (110), avant de s'infléchir par effet de saturation, ce qui indique probablement que le glissement simple perdure sur tout l'intervalle de déformation.

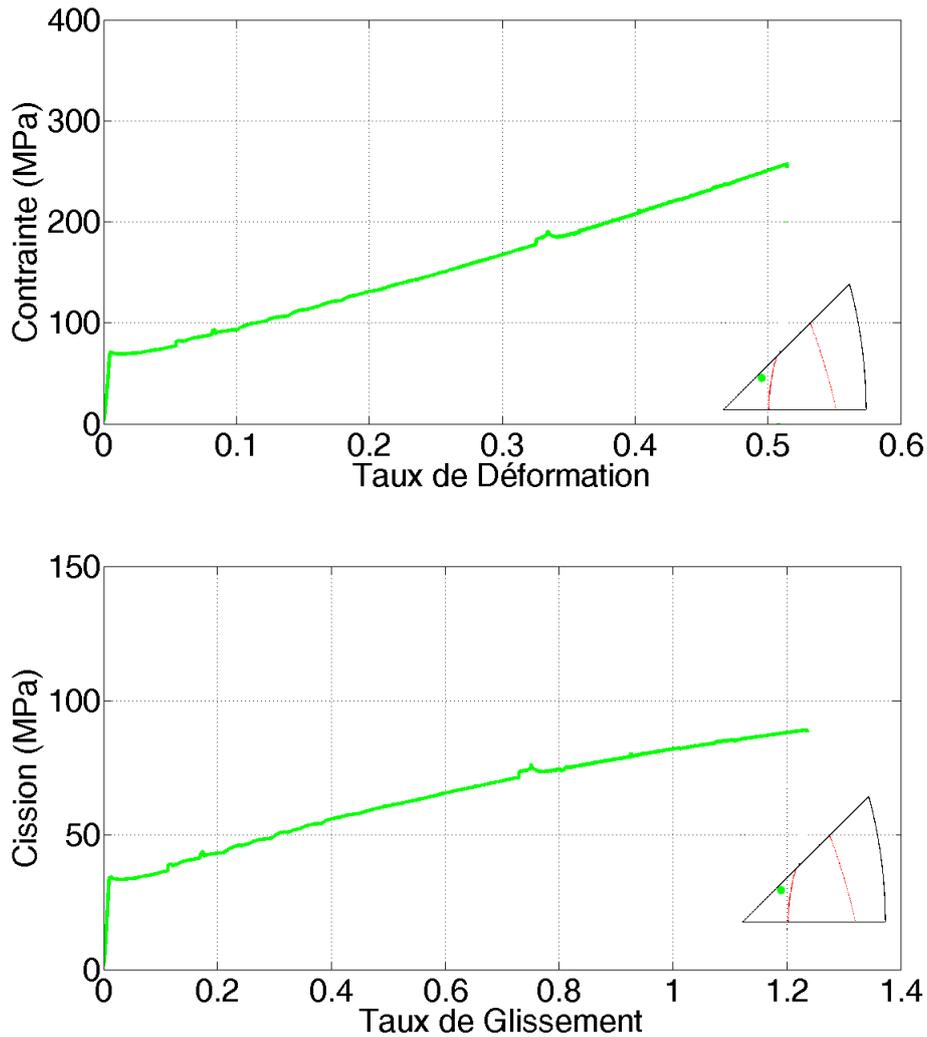


Figure IV.20 : Courbes contrainte –déformation et cission-glissement de la traction 112F-1

Le taux d'érouissage moyen $\langle H \rangle_{112F-1} \leq 44 \text{ MPa}$, est beaucoup plus petit que le taux d'érouissage de système de glissement 110. Et $H_{\max} \leq \mu/1000$ corresponde au taux d'érouissage du **stade I** dans la littérature.

Traction (112)F, essai 2: axe de traction initial $\langle 001 \rangle$, normale à la surface $\langle 010 \rangle$

m	n	Facteur de Schmid	Angle de trace sur la surface	Facteur de visibilité
-1 1 1	1 -1 2	0.4787	119	0.57
1 1 1	1 1 -2	0.4787	118	0.57
<i>-1 -1 1</i>	<i>1 1 2</i>	<i>0.4624</i>	<i>66</i>	<i>0.62</i>
<i>1 -1 1</i>	<i>-1 1 2</i>	<i>0.4624</i>	<i>64</i>	<i>0.53</i>

Tableau IV. 7 : Système de glissement le plus grande facteur de Schmid

Deux essais de traction ont été réalisés sur cette orientation et le comportement observé est le même. Les observations sont rapportées **Figures IV-21 à IV-23**.

Ce monocristal est quasiment dans une orientation cube, ses 3 normales principales étant proches d'une direction $\langle 001 \rangle$. La petite différence entre les 4 facteurs de Schmid indique néanmoins que l'axe est écarté de $\langle 001 \rangle$ vers la direction $\langle 011 \rangle$. L'axe $\langle 001 \rangle$ est une orientation où il est possible d'observer un glissement sur un ou plusieurs des 4 système de glissement (112)F. Mais cet axe n'est pas stable sauf si les 4 systèmes ou bien 2 symétriquement positionnés sont activés en quantités égales, ce qui est improbable. Tout écart à l'orientation symétrique précise conduira à un éloignement de l'axe $\langle 001 \rangle$. Dans le cas présent, les 2 systèmes de facteur de Schmid principal devraient induire une rotation vers $\langle 011 \rangle$ s'ils étaient également actifs et de manière homogène.

Les micrographies de cet essai présentent des lignes plus nettes que l'essai précédent, elles restent néanmoins sinueuses.

Sur la face d'observation, les 2 systèmes principaux ont la même trace, qui est bien celle des glissements observés. On ne peut donc trancher entre glissement double sur ces 2 systèmes et glissement simple sur l'un des deux, ou bien la succession de ces deux possibilités.

C'est donc la rotation mesurée, pleinement vers une direction de glissement $\langle -111 \rangle$, qui est plutôt en faveur d'un glissement instable de type (112)F sans pouvoir indiquer s'il y a ou non un stade initial de glissement double, assurément bref s'il existe.

On constate encore une fois que la rotation se poursuit loin au-delà de la zone où les systèmes de plan (110) deviennent les plus sollicités. La courbe contrainte-déformation est différente de celle de l'essai précédent avec un écrouissage quasi linéaire jusqu'à l'approche de la saturation et plus fort en première partie que pour l'essai précédent d'environ 25 à 30% alors que l'écart de facteur de Schmid principaux n'est que de 2%. Ceci est en faveur d'un glissement qui n'est pas simple en première partie.

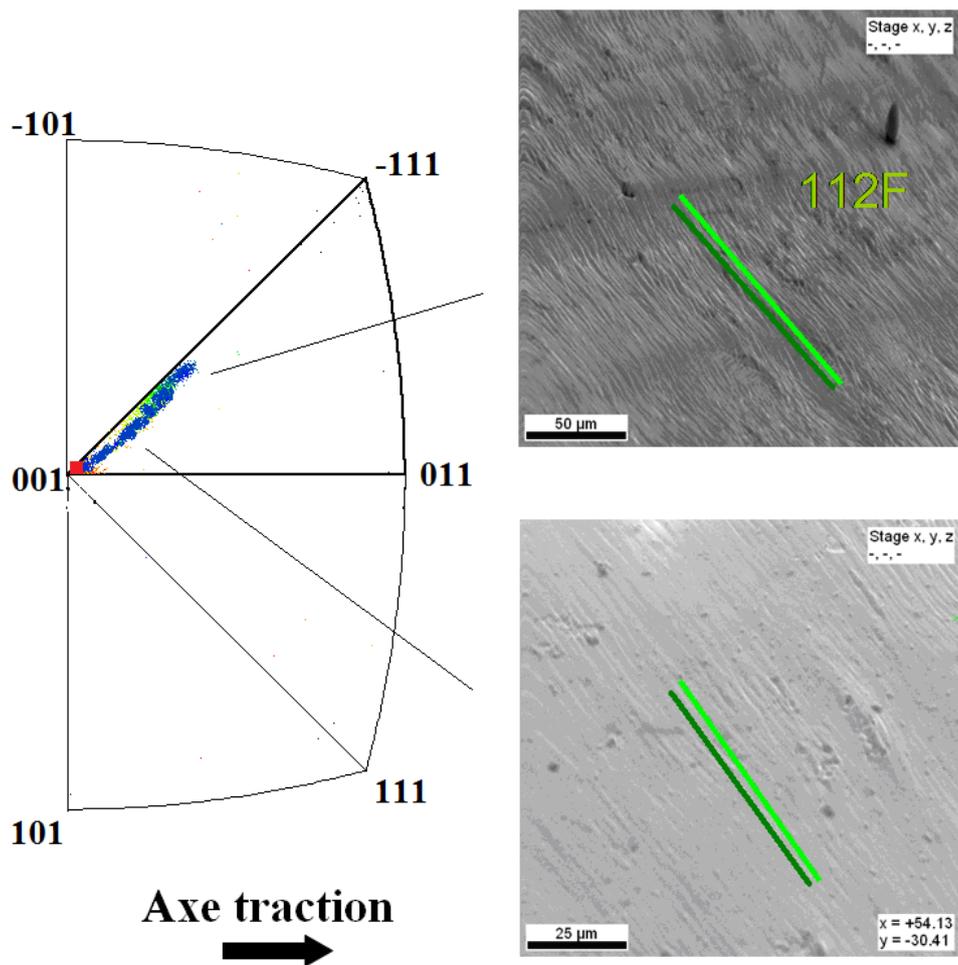


Figure IV.21 : Système de glissement principale 112F « ligne verte » $\langle -1\ 1\ 1 \rangle [1\ -1\ 2]$ et/ou le système de glissement secondaire « ligne verte foncé » $\langle 111 \rangle [11\ -2]$

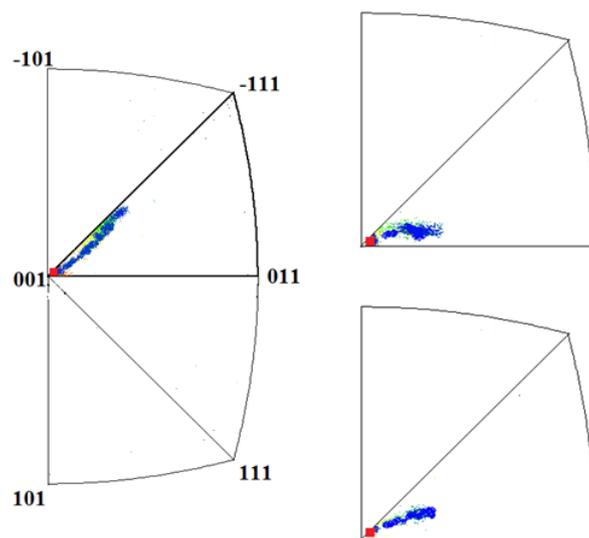


Figure IV.22 : Les rotations mesurées par rapport aux trois axes de l'éprouvette (traction 112F - 2).

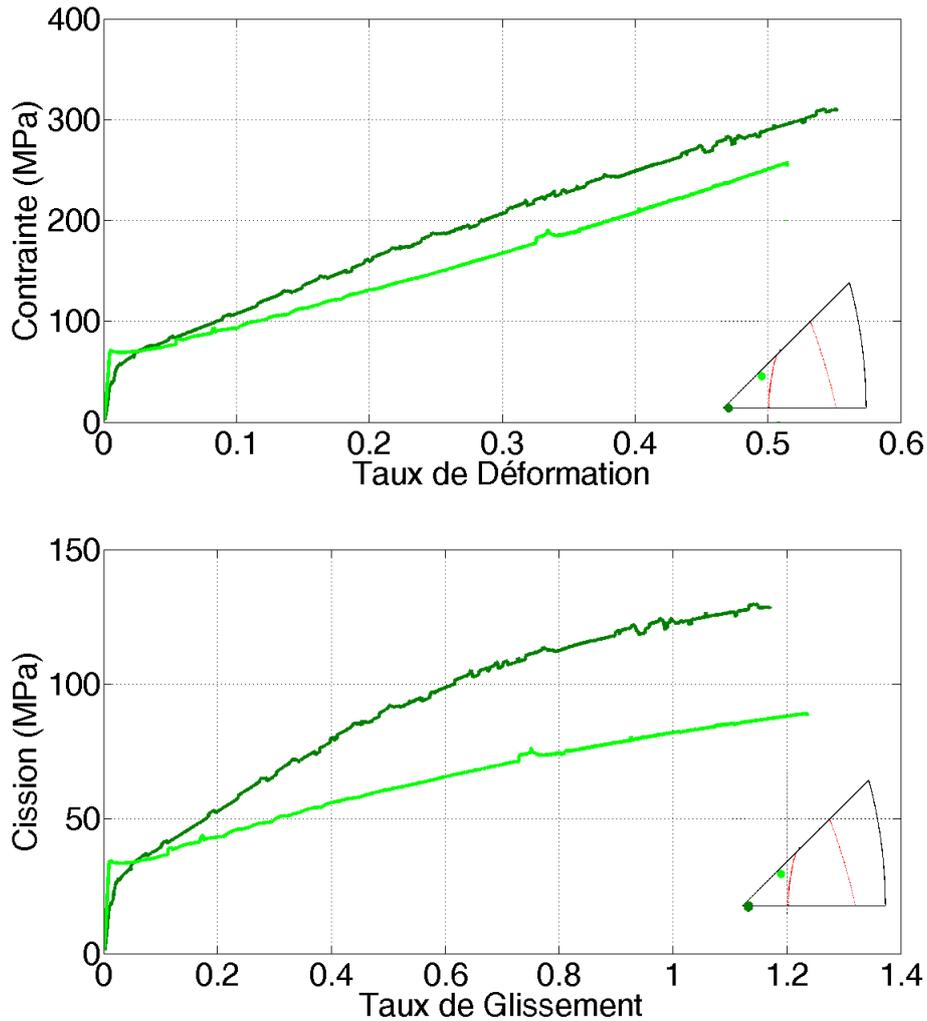


Figure IV.23 : Courbes contrainte –déformation et cission-glisement comparées

La courbe cission-glisement est tracée avec l’hypothèse de glissement double non-stable qui est vraisemblable en première partie de courbe. Le taux d’écroissage moyen dans cette hypothèse est $\langle H \rangle_{112F-2} \approx 90MPa$. Par rapport à l’essai précédent il serait à peu près le double.

On notera que dans une hypothèse de glissement simple, le taux de glissement est approximativement le double et l’écroissage est diminué environ de moitié ce qui le rend comparable à la courbe de l’essai précédent. Cette remarque conduit à attribuer à l’interaction entre les 2 systèmes (112)F qui seraient simultanément actifs un niveau comparable à l’interaction dipolaire effective du système (112)F qui serait seul actif.

Mais il n’apparaît pas possible de trancher ici entre glissement simple (112)F dès le début de l’essai ou bien une succession glissement double initial suivi de glissement simple (112)F.

Ceci d’autant que l’effet de libre parcours moyen réduit par le nombre de systèmes équisollicités influence fortement le niveau d’écroissage dans ces cas très symétriques. Nous y reviendrons.

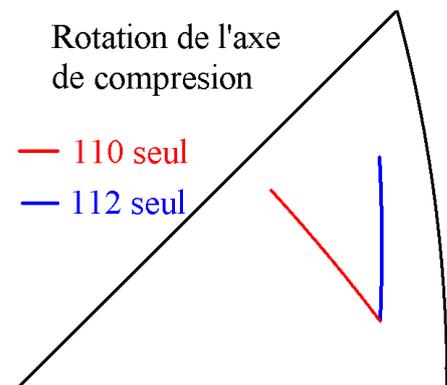
Compression (112)F, essai 1: axe de compress <-3 19 22>, normale à la surface <- 29 1/19 -4>

m	n	Facteur de Schmid	Angle de trace sur la surface	Facteur de visibilité
1 1 1	-1 0 1	0.4541	130.5	0.66
1 1 1	-2 1 1	0.4929	92	0.66

Tableau IV. 8 : Système de glissement le plus grande facteur de Schmid

Les observations sont rapportées **Figures IV.24 à IV.26.**

Cette orientation est dans la zone où on peut activer le système de glissement 112F en compression. D'après les rotations simulées sur le triangle de référence ci-contre dans une hypothèse de compression uniaxiale avec les conditions aux limites idéales rapportées au chapitre I., si le système de glissement (110) s'active, la rotation de réseau est représentée par la ligne rouge. Si le système de glissement (112) s'active, la rotation est représentée par la ligne bleue.



L'observation MEB nous confirme le glissement est plutôt de type 112F simple, mais la rotation n'est pas pleinement vers la normale au plan de glissement (112).

Si l'essai de compression est sans artefact, une contribution de glissement colinéaire (110) ne peut être exclue, d'autant que les lignes de glissement sont sinuées comme c'est le plus souvent le cas lorsque le glissement (112)F est le plus sollicité. Mais la condition de l'essai de compression étant très difficile à contrôler, on ne peut non plus exclure quelques imperfections de l'essai.

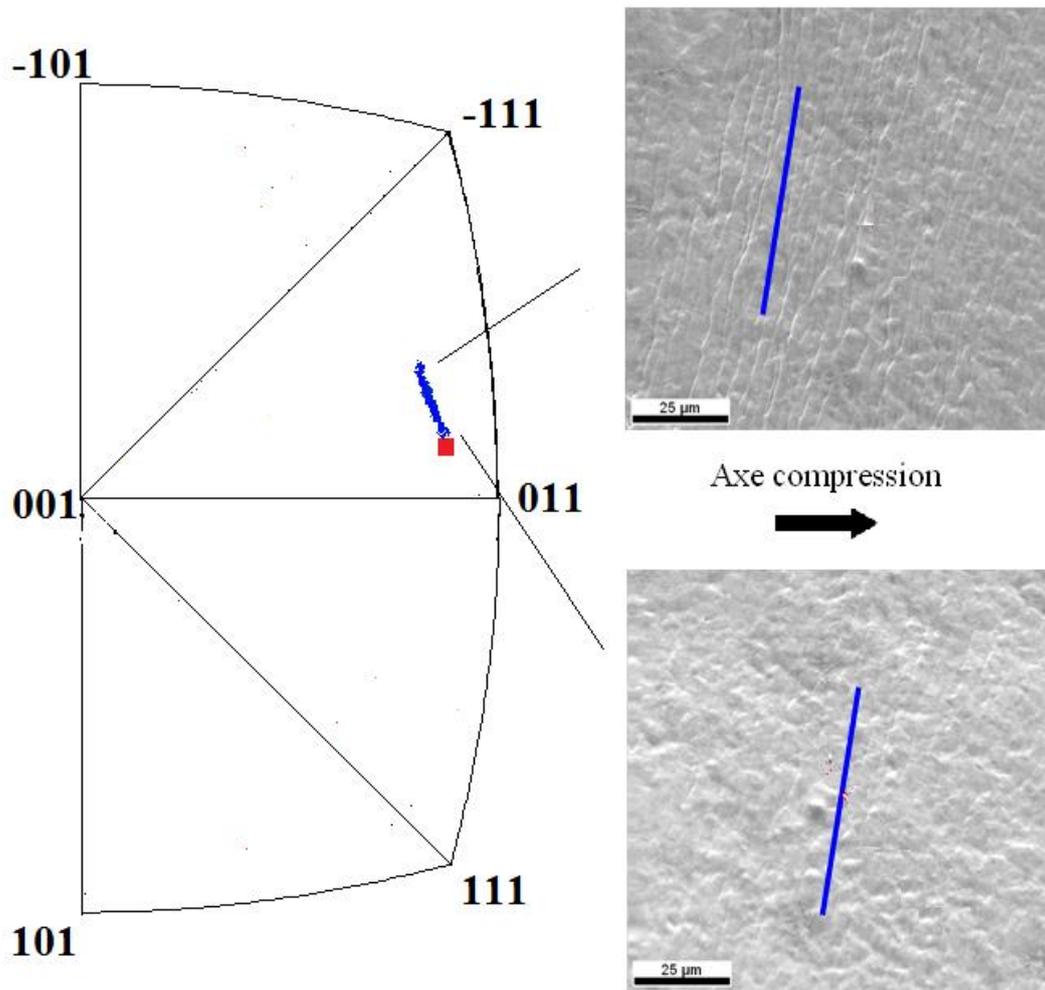


Figure IV.24 : Système de glissement principale $(112)F$ en bleu. La rotation associée au glissement est vers la normale au plan de glissement $(112)F$

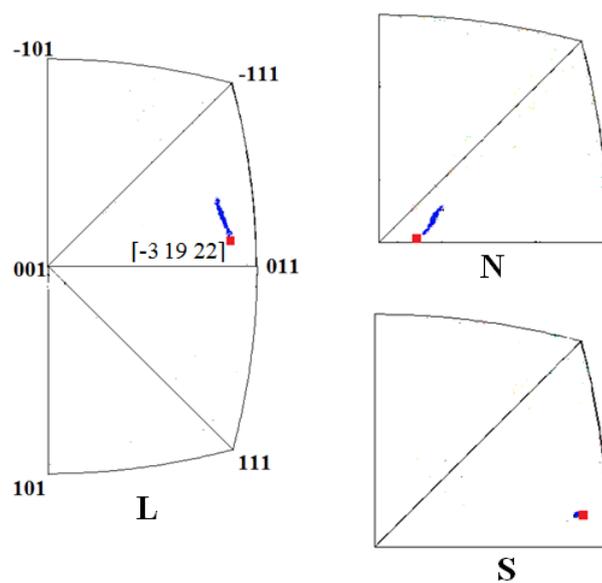


Figure IV.25 : La rotation de trois axes de l'éprouvette

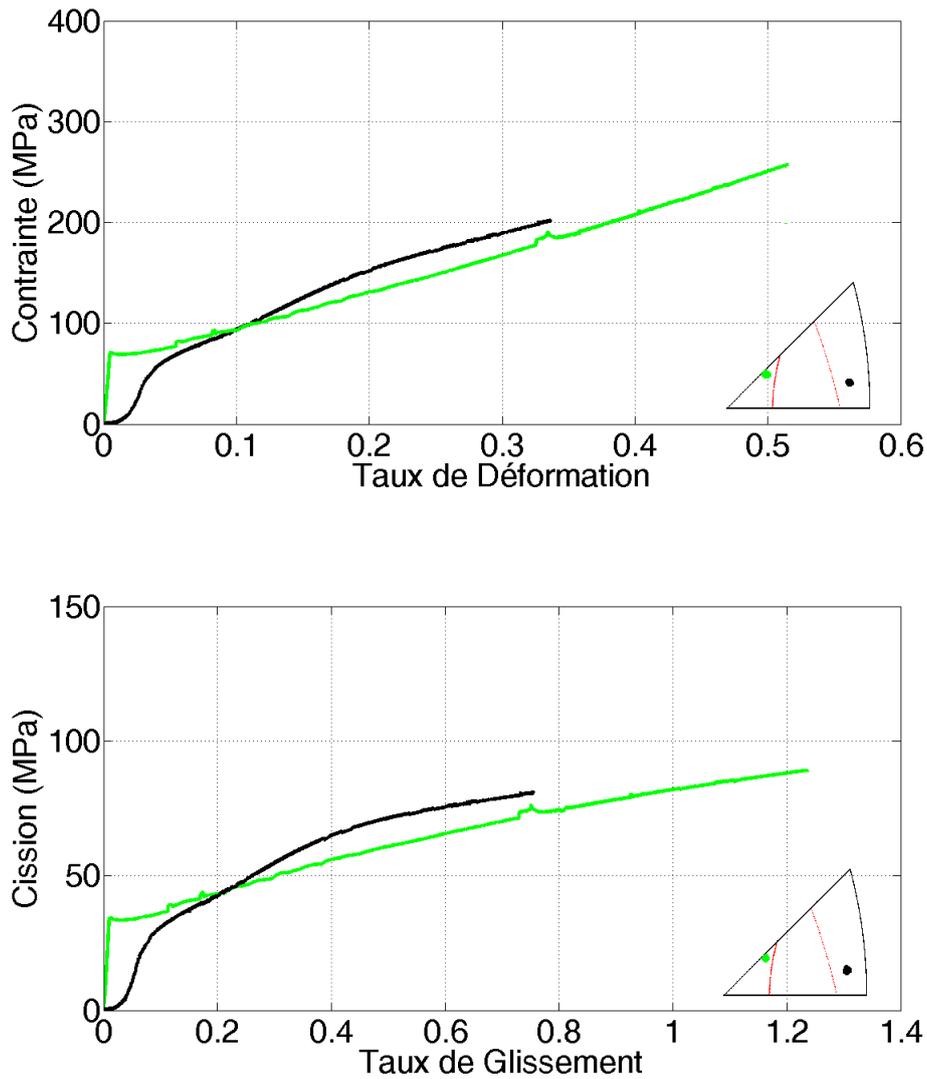


Figure IV.26 : Compare la courbe traction (verte)-compression (noir) du glissement 112F

La courbe cission-glissement est tracée avec l'hypothèse de glissement simple sur le système principal. Cet essai en compression est comparé **Figure IV.26** à un essai de traction dans la zone où le glissement (112)F est activé en traction. Ne s'agissant pas d'une même configuration générale d'essai dont le **chapitre III** a montré l'importance, le comportement mécanique du système de glissement 112F en traction et compression est proche : les cissions critiques sont proches, la forme de courbe est assez semblable, les niveaux d'écroutissage sont comparables également.

IV.3. Orientations de glissement sur plans (112) sens difficile (D).

L'activation de systèmes de glissement de plan de glissement (112) difficile n'est possible en traction qu'au plus près de la zone $\langle 011 \rangle - \langle -111 \rangle$, tout au long de laquelle, les facteurs de Schmid avec les systèmes de plans (110) voisins colinéaires sont dans un rapport constant de 1,1547 ($2/\sqrt{3}$ exactement).

En compression il faut se placer près d'un axe $\langle 001 \rangle$ (sur lequel le rapport de facteur de Schmid vaut aussi 1,1547) mais les éprouvettes de cette orientation sont plus rares et le glissement de type (112) sera difficilement mono directionnel puisque les 4 directions sont sollicitées de manière peu différente. Si on n'observe pas de plan (112)D sur ces zones on ne les observera nulle part, quel que soit le type de sollicitation appliqué. On peut en effet aisément vérifier qu'il n'existe aucun état de contrainte qui induise un rapport supérieur à $2/\sqrt{3}$ entre les cisssions résolues sur un système principal de plan (112) et un système secondaire de plan (110).

Nous avons mis en évidence du glissement (112) difficile dans plusieurs des essais réalisés dans ces zones favorables, en traction et en compression.

Nous reportons 2 essais de traction homogènes, un essai de traction hétérogène et un essai de compression plutôt homogène, montrant ce glissement sans ambiguïté.

Traction 112D, essai 1: axe de traction $\langle -1\ 20\ 21 \rangle$, normale à la surface $\langle -25\ -12\ 10 \rangle$

m	n	Facteur de Schmid	Angle de trace sur la surface	Facteur de visibilité
1 1 1	-2 1 1	0.4815	54	0.52
-1 1 1	2 1 1	0.4585	127	0.45
1 1 1	-1 0 1	0.4267	96	0.52
1 1 1	-1 1 0	0.4073	32	0.52
-1 1 1	1 0 1	0.4073	148	0.45
-1 1 1	1 1 0	0.3869	83	0.45

Tableau IV.9: Systèmes de glissement le plus grands facteurs de Schmid

Les observations sont reportées **Figures IV.27 à IV.29**.

Cette orientation est très proche de l'axe $\langle 011 \rangle$ donc d'une situation optimale pour l'activation de systèmes (112) en sens difficile. Sur cet axe, on a 4 systèmes de glissement de type (110), 2 paires de systèmes colinéaires, avec facteurs de Schmid proches de 0,408 ($1/\sqrt{6}$) et l'axe de traction reste stable si 2 systèmes non colinéaires sont equi-actifs. On a également 2 systèmes de glissement de type (112)D, facteur de Schmid proche de 0,47 ($\sqrt{2}/3$) et l'axe de traction reste stable si les 2 sont

equi-actifs. L'essai de traction en glissement (110) a montré que c'est très difficile d'avoir glissement non colinéaire de plans (110) autour de la zone $\langle 001 \rangle - \langle 011 \rangle$ sauf si on est très proche de (quasiment sur) cette zone.

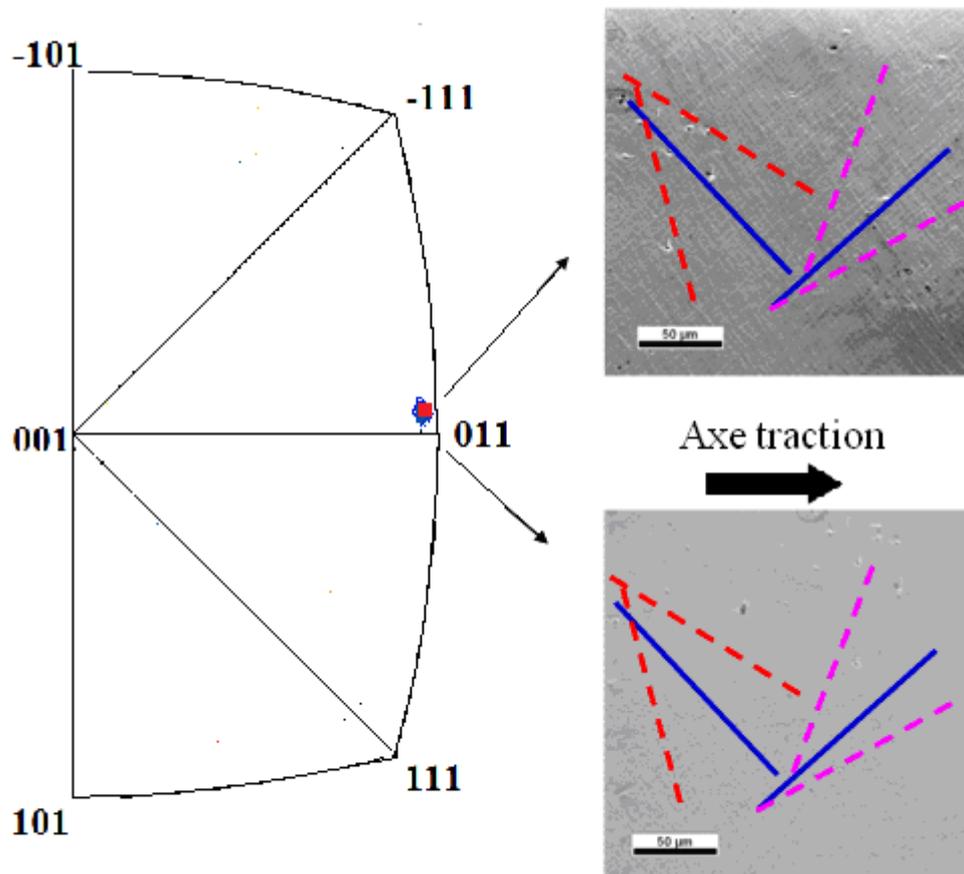


Figure IV.27 : Glissement double de type (112)D « ligne bleu » et de type (110) « tirets rouge et violet ». Les deux familles de glissement apparaissent presque en même temps sur la surface observée.

Sur les micrographies de la **figure IV.27** on observe 2 traces indiquant un glissement double, et compte tenu de la grande stabilité de l'axe les 2 directions de glissement sont equi-actives. Les traces sont plutôt vers les traces théoriques des plans (112)D en traits pleins bleu. Les traces de glissement sont sinueuses ce qui est également en faveur de glissements (112)D car on a constaté que le glissement (110) était plus rectiligne. Mais il est là encore difficile d'exclure que du glissement dévié (112)D + (110) soit actif, pour chacune des 2 directions de glissement symétriques. On ne peut néanmoins pas aisément traiter les traces sinueuses observées comme la combinaison de 2 glissements colinéaires sur les plans (110) seuls. Les sinuosités seraient plus fortes car les angles entre plans (110) sont plus grands.

La conclusion d'un glissement double équilibré est renforcée par la stabilité complète du cristal dont aucun des 3 axes principaux ne montre de rotation.

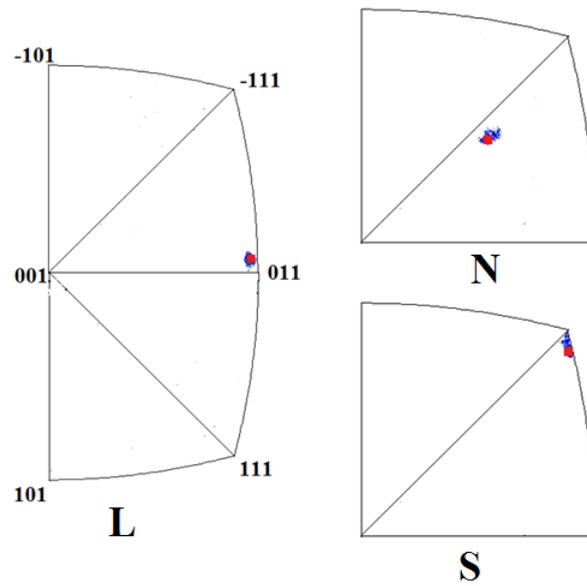


Figure IV.28 : La rotation cristalline de cet essai est stable ce qui indique un glissement symétrique selon les 2 directions de glissement.

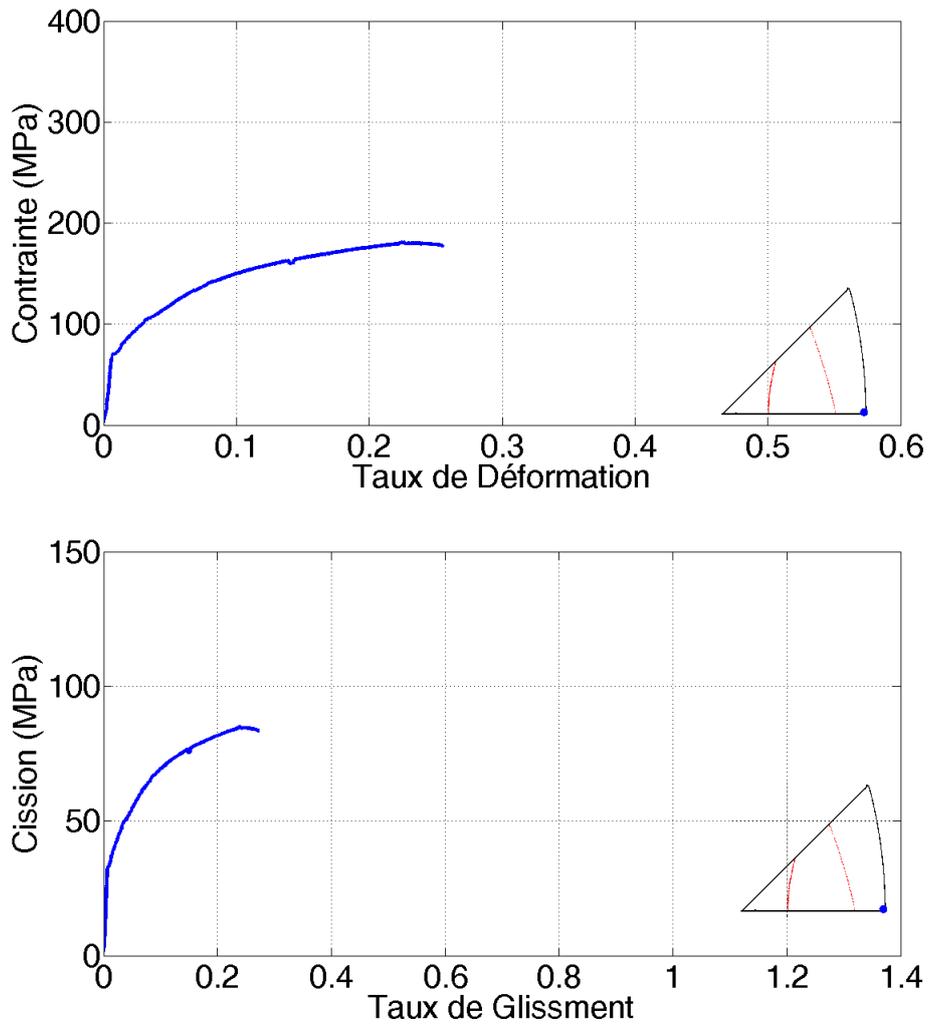


Figure IV.29 : Courbes contrainte –déformation et cission-glissement de traction 112D-1

La courbe cisssion-glisement est tracée avec l'hypothèse de glissement double symétrique et stable. Le taux d'écroissage $\langle H \rangle_{112D-1} = 225\text{MPa}$ donne un écroissage $H_{\text{max}} = 450\text{MPa} \approx \mu / 200$ qui est plus fort que la valeur de l'essai 110-3 qui montrait du glissement double non stable sur plans (110).

Traction 112D, essai 2: axe de traction $\langle -2\ 10\ 11 \rangle$, normale à la surface $\langle 21\ 3\ 1 \rangle$

m	n	Facteur de Schmid	Angle de trace sur la surface	Facteur de visibilité
$\langle 1\ 1\ 1 \rangle$	$[-2\ 1\ 1]$	0.4976	102	0.65
$\langle -1\ 1\ 1 \rangle$	$[2\ 1\ 1]$	0.4096	63	0.46
$\langle 1\ 1\ 1 \rangle$	$[-1\ 0\ 1]$	0.4482	135	0.65
$\langle 1\ 1\ 1 \rangle$	$[-1\ 1\ 0]$	0.4137	58	0.65

Tableau IV.10: Systèmes de glissement le plus grands facteurs de Schmid

Les observations sont reportées **Figures IV-30 à IV-32.**

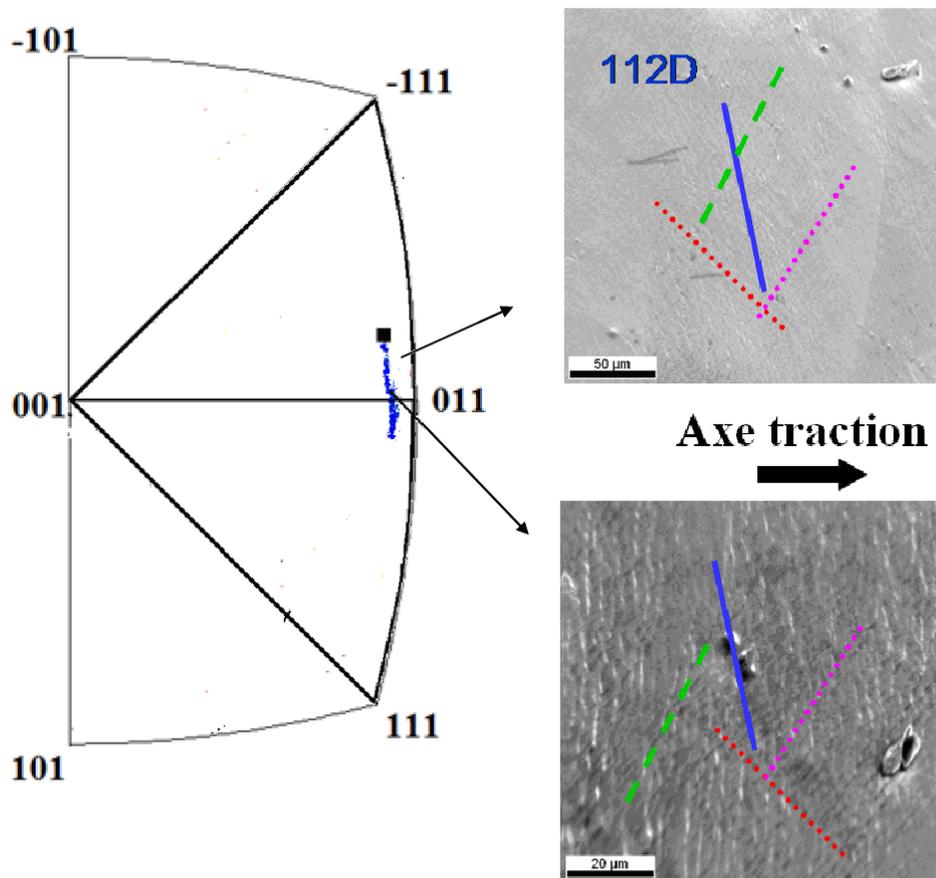


Figure IV.30 : Système de glissement principe $\langle 111 \rangle [-211]$ « ligne bleu », peu de glissement secondaire $\langle -111 \rangle [211]$ « tiret vert » quand on traverse la zone $\langle 001 \rangle - \langle 011 \rangle$

Le rapport de facteur de Schmid des systèmes de glissement favorables (112)D et (110) est égal à $R1/R2=1.11$, ce qui est encore assez grand pour espérer observer un glissement 112D simple initialement. Toutefois, dans cet essai la rotation vers la direction de glissement ne permet pas d'exclure la présence d'un glissement colinéaire sur le plan (110) proche. Les lignes de glissement présentant beaucoup de sinuosités, on ne peut en conclure dans ce cas que la compatibilité d'un glissement (112)D avec les observations, ou à la rigueur d'un glissement colinéaire sur un plan (112)D et un plan (110). L'hypothèse d'un glissement purement (110) est mise en défaut par l'apparence sinueuse des traces, alors qu'en général le glissement (110) apparaît plus plan qu'observé ici.

La courbe contrainte-déformation ne nous apporte pas d'information utile à l'identification du système actif, hormis le fait que la pente modérée signe plutôt un glissement simple, étant donné (par les résultats de DD) que l'interaction colinéaire est forte et donc pas si favorable.

Le taux d'écroutissage moyen est $\langle H \rangle_{112D-2} = 82\text{MPa}$, ce qui est proche de la valeur moyenne des cas d'activité d'un système de glissement (110) simple.

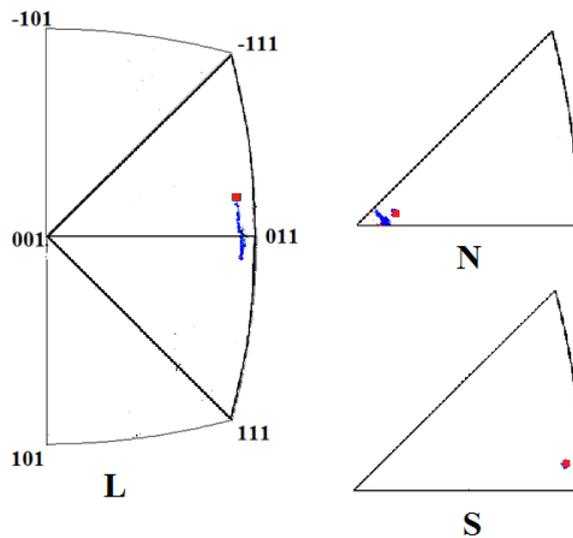


Figure IV.31 : La rotation de trois axes de l'éprouvette

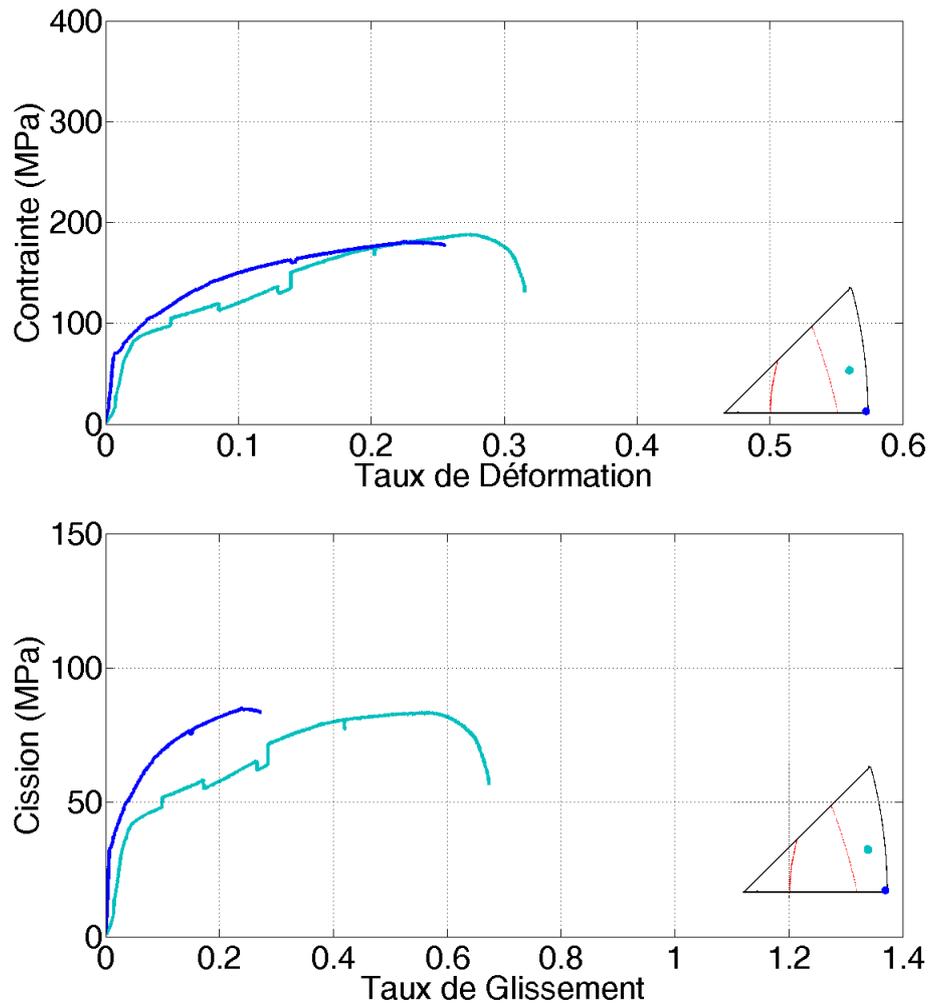


Figure IV.32 : Courbes contrainte –déformation et cission-glissement

Traction 112D, essai 3 : axe de traction $\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$, normale à la surface $\langle -1 \ 1 \ -2 \rangle$

m	n	Facteur de Schmid	Angle de trace sur la surface	Facteur de visibilité
1 1 1	-2 1 1	0.3293	107	0.48
-1 -1 1	-1 2 1	0.3137	73	0.44
1 -1 1	-1 1 2	0.2992	91	0.95

Tableau IV.11: Systèmes de glissement le plus grands facteurs de Schmid

Les observations sont rapportées **Figure IV.33 à IV.35**.

Pour cette orientation symétrique, trois systèmes (112)D sont quasiment équi-sollicités pour un facteur de Schmid proche de 0,314 ($2\sqrt{2}/9$), alors que 6 systèmes de plan (110) ont un facteur de Schmid proche de 0,272 ($2/3\sqrt{6}$). On est là encore dans une situation optimale en termes de ratio

de cissons résolues sur les plans (112) et (110). Les lignes de glissement sont nettement moins sinueuses que les autres cas de glissement (112)D, notamment ceux de l'essai précédent proche de l'axe $\langle 011 \rangle$. Elles sont également nettement moins sinueuses que les cas de glissement (112)F en traction comme en compression. Dans la zone du système le plus actif, la rotation est tout à fait semblable à la rotation de glissement simple, vers la direction $\langle 111 \rangle$ de glissement correspondante.

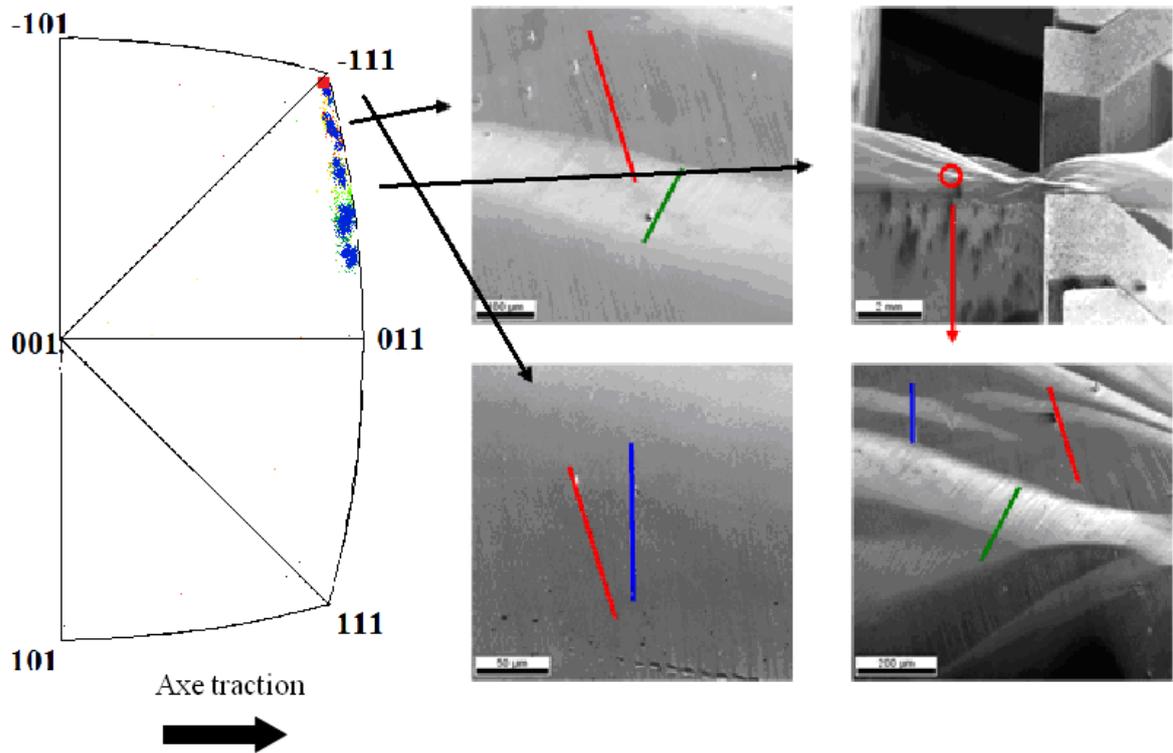


Figure IV.33 : Traction proche de $\langle -111 \rangle$. Glissement principal $\langle 111 \rangle [-211]$ « ligne rouge », bandes de glissement $\langle -1-11 \rangle [-121]$ « ligne verte », et de glissement $\langle 1-11 \rangle [-112]$ « ligne bleu », ce sont les trois systèmes de glissement difficile 112D equi-sollicités.

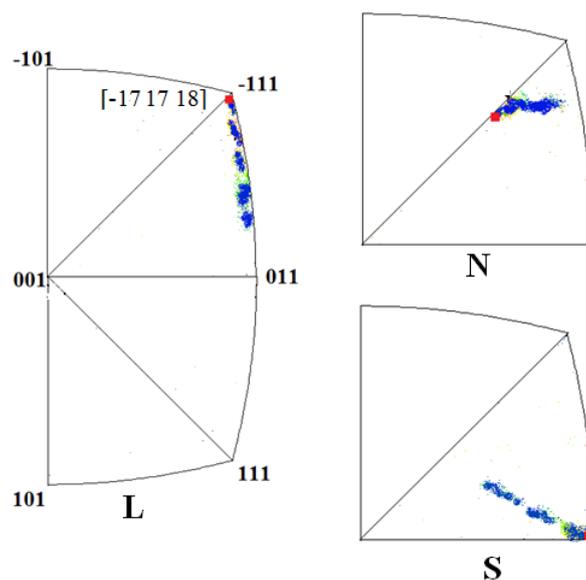


Figure IV.34: Rotation cristalline dans la zone principale d'éprouvette (traction $\langle 111 \rangle$).

Sur la courbe contrainte-déformation, la consolidation est plus forte que pour un glissement (112)D simple et homogène, ce qui ne provient pas uniquement du plus faible facteur de Schmid dans ce cas mais aussi de la nature hétérogène de la déformation.

La courbe cisssion-glissement est tracée avec l'hypothèse de glissement triple non stable.

Le taux d'écroutissage moyen dans cette hypothèse est de $\langle H \rangle_{112D-3} = 185 \text{MPa}$. Cette valeur est plus grande que le cas de glissement simple de l'essai précédent mais plus faible que pour le glissement double de l'essai de traction proche de l'axe $\langle 011 \rangle$. Ceci est en faveur d'un glissement plutôt de type simple avec des systèmes différents dans des zones différentes que d'un glissement triple.

Cette valeur d'écroutissage est également plus grande que la valeur d'écroutissage d'un glissement double non stable 110-3.

Si on multiplie par 3 le taux de glissement de cet essai pour passer (grossièrement) d'un glissement triple équilibré à un glissement simple on divise le taux d'écroutissage du même facteur 3 ce qui donne 61MPa, à comparer aux 82MPa du glissement simple précédent.

La différence peut aussi bien provenir de contribution de plusieurs systèmes sans qu'il s'agisse de glissement triple équilibré, que des effets des hétérogénéités.

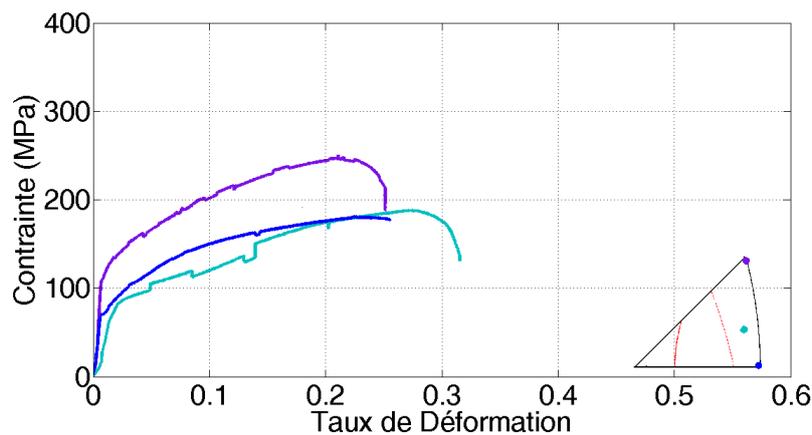


Figure IV.35.a : Compare courbes contrainte-déformation de traction 112D

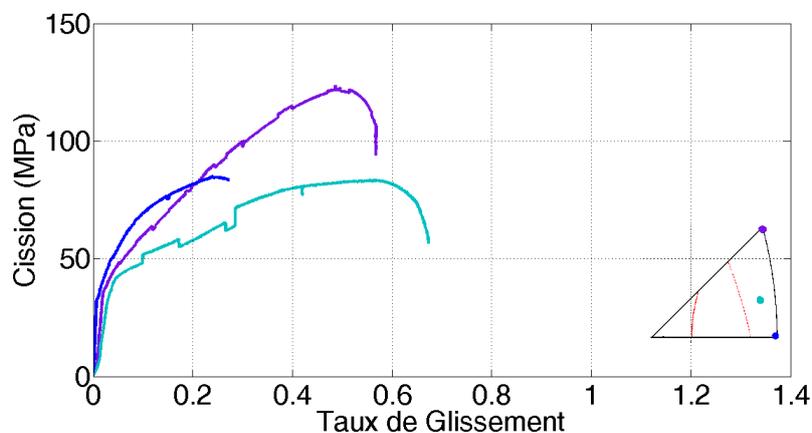


Figure IV.35.b : Compare courbes cisssion-glissement de traction 112D

Compression 112D essai 1: Axe initial= [-1 4 21] Normale initiale = [-25 1 1]

m	n	Facteur de Schmid	Angle de trace sur la surface	Facteur de visibilité
-1 1 1	1 -1 2	0.4951	128.8	0.53
1 1 1	-1 -1 2	0.4817	126	0.62
-1 -1 1	1 1 2	0.4169	74.8	0.58
-1 1 1	1 0 1	0.4635	103	0.53
1 1 1	-1 0 1	0.4706	98.7	0.62
-1 -1 1	0 1 1	0.4011	145.7	0.58

Tableau IV.12: Systèmes de glissement le plus grands facteurs de Schmid

Les observations sont rapportées **Figures IV.36 à IV.38**. Le tableau des facteurs de Schmid nous montre que si on fait un essai de compression dans cette zone, on peut activer un système de glissement (112)D voire plusieurs puisque 4 ont des facteurs de Schmid proches.

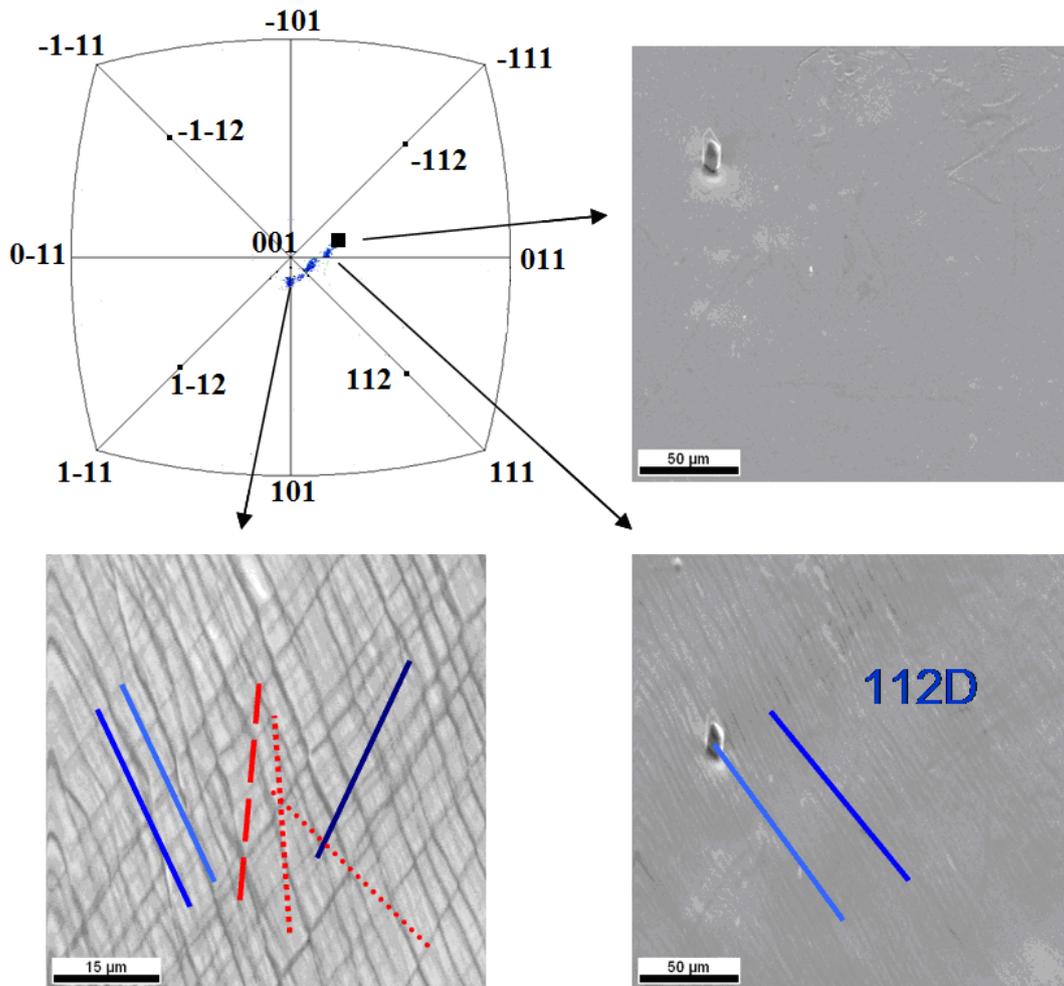


Figure IV.36 : Bref glissement simple puis glissement double (1-12) \langle -111 \rangle et (-1-12) \langle 111 \rangle et ensuite glissement triple avec système de glissement (112) \langle -1-11 \rangle . Les lignes de glissement de système de type (110) en pointillés et tirets rouge ne correspondent à aucune trace sur la surface.

Si un système de glissement (112)D est activé, l'axe de compression va tourner vers la normale $\langle 112 \rangle$ au plan de glissement actif. Si on active un système de plan (110), la rotation vers la normale $\langle 110 \rangle$ associée fera la distinction sans ambiguïté. Si 2 systèmes de glissement (112)D sont activés symétriquement, l'axe de compression va tourner vers l'axe $\langle 001 \rangle$ médian.

Le résultat EBSD établit cette fois une rotation de l'axe de compression vers la normale du système de plan (112) le plus sollicité, et les images MEB nous donne une trace de glissement plus proche de système de glissement (112)D que de (110). Ce qui confirme une activité de système de glissement (112)D en compression dans un voisinage de $\langle 001 \rangle$. La suite des évènements entraîne l'activation successive de 2, voire 3 systèmes de plans (112)D, l'axe de compression tournant autour de l'axe $\langle 001 \rangle$.

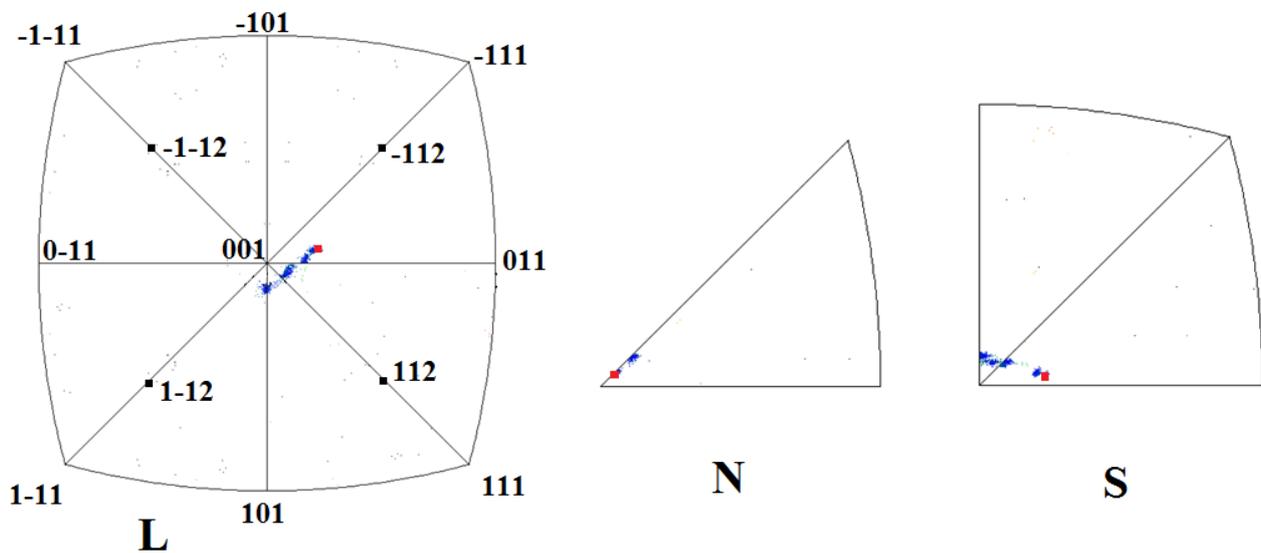


Figure IV.37 : Rotation des trois axes de l'éprouvette de compression 112D

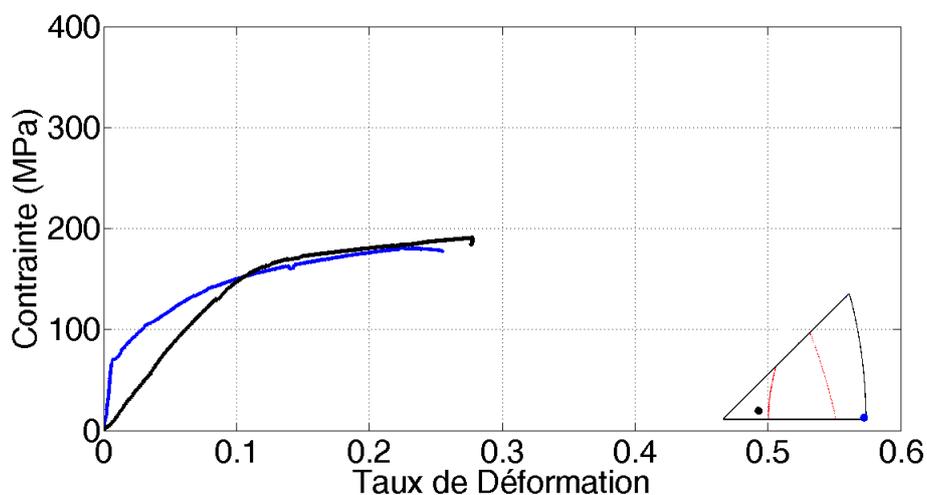


Figure IV.38 : Courbes contrainte-déformation comparées en traction (bleu) et compression (noire).

La **Figure IV.38** compare la courbe contrainte déformation avec celle de traction en glissement double (112)D. Après un début particulier de l'essai de compression, portant sûrement quelques artefacts d'essais, les pentes sont comparables, ce qui est en accord avec un glissement double en compression également. La courbe cisssion-glissement glissement double sera donc également comparable dans l'hypothèse de glissement double.

IV.4. Simulations numériques des essais.

L'analyse expérimentale des essais in situ MEB associant observations micrographiques et mesures de rotations cristallines a permis de mettre en évidence l'activité intrinsèque de glissement sur plans (112) dans le sens facile comme dans le sens difficile, dans un contexte où la loi de Schmid apparaît moins mise en défaut que si l'on suppose que seuls les plans (110) sont des plans de glissement.

Au point de vue plus quantitatif des cissions critiques, des taux d'écrouissage et des intensités d'interactions, les résultats sont de plus grande complexité à analyser, pour de multiples raisons.

La première, qui a fait l'objet de l'analyse préliminaire rapportée au **chapitre III**, provient des caractéristiques même de la co-existence de plusieurs familles de systèmes de glissement pour les cristaux CC, et notamment d'une nature asymétrique, quelle qu'en soit la raison, portée par certaines de ces familles, en fait la famille des plans (112).

Le **chapitre III** a montré que la prise en compte de ces systèmes (112)<111> pourvus d'une spécificité d'asymétrie subdivise le triangle standard non seulement en 3 zones par rapport à l'activation préférentielle des plans (110), (112) sens facile et (112) sens difficile, mais aussi en 7 zones dans lesquelles des systèmes d'une même famille peuvent avoir des cissions critiques différentes dues à des ensembles variables d'interactions de paires, en orientation et en signe de chargement. L'asymétrie peut apparaître ou se manifester de différentes manières a priori :

- au travers de la matrice des coefficients d'interactions entre systèmes elle-même, dont la dimension 24x24 (ou même 36x36 avec des systèmes (112) asymétriques) et son nombre élevé de coefficients géométriquement différents est déjà en soi une cause de grande variabilité ;
- au travers de contributions dissymétriques des glissements déviés tels qu'ils ont été montré agir dans la loi d'écrouissage par des calculs de dynamique de dislocations de la littérature ;
- au travers de couplages entre systèmes de glissement, notamment entre systèmes colinéaires, que ce couplages impliquent ou non des contraintes autres que les cissions résolues sur les systèmes de glissement.

Il ne faut pas oublier qu'une part de ce caractère d'asymétrie est portée par la contrainte de Peierls, la friction de réseau étant plus forte dans le sens (112)D que dans le sens (112)F (**JUL 2006, ITA 2012**). A ces variabilités intrinsèques relevées dans la littérature (**JAO 1961, TAK 1967**) il nous faut ajouter les limites propres de nos essais in situ, sur éprouvettes de sections petites, découpées par un procédé d'electro-erosion peu endommageant mais néanmoins endommageant, et dans des cristaux sur lesquels il n'a été pratiqué ni recuit d'homogénéisation ni traitement de décarburation.

A cet égard, l'étude porte donc de fait sur une ferrite commerciale de microstructure très proche de l'état en service mais il est quasiment impossible de tirer des informations fines sur les différences de limite élastique selon l'orientation et le type de système activé.

Ajoutons encore que les éprouvettes testées proviennent de différents cristaux dont les densités de dislocation peuvent varier, selon l'épaisseur de la plaque d'origine voire quelques fluctuations sur le protocole d'élaboration complet décrit au **chapitre I**.

Il est de ce fait également incertain de se livrer à des comparaisons trop poussées entre les différents taux d'écroutissage entre les essais, même si, nous l'avons constaté, certaines de ces différences se sont avérées reproductibles et en cohérence avec les observations de rotations, d'overshoot présent ou absent, de glissement simple ou multiple etc.

Pour toutes ces raisons, les simulations numériques que nous avons effectuées pour valider nos résultats se sont largement appuyées sur les apports de la DD, à la fois ceux obtenus pour les cristaux CC essentiellement traités dans l'hypothèse d'un glissement (110) et ceux plus complets obtenus pour les cristaux CFC.

La plupart des lois constitutives ont été présentées au chapitre I, nous les rassemblons de nouveau ci après. Pour confronter à nos essais et notamment lorsque le glissement (112) est actif, le formalisme a dû être adapté. Les adaptations faites sont précisées et argumentées.

Il a bien sur fallu intégrer une matrice de coefficients d'interactions de taille augmentée mais dans laquelle la plupart des coefficients d'interaction entre systèmes de plans (112) et entre couples mixtes de systèmes impliquant un plan (110) et un plan (112) manquent encore, même si des travaux de DD ont déjà été menés et ne devraient pas tarder à être publiés (Kubin, Madec, communication privée). La question de la manière dont le caractère asymétrique du glissement (112) se manifeste ou s'exprime dans ces coefficients n'est pas tranchée complètement.

Mais au-delà de l'extension de cette matrice aux systèmes de plans (112), il a fallu aussi étendre à plusieurs systèmes colinéaires la prise en compte de leur rôle dans l'expression des cissions critiques dans une loi établie pour la structure CFC ou chaque système ne compte qu'un colinéaire. Chaque système de glissement de la structure CC en compte au moins 2 si l'on ne tient compte que des plans (110) et 5 si l'on intègre les 3 plans (112) de zone de chacune des directions de glissement. Le sens du glissement dévié sur un plan étant défini par le signe de la cission sur ce plan, nous avons vu que seuls 3 plans d'une même zone $\langle 111 \rangle$ pouvaient être simultanément sollicités, avec un plan principal au centre du triplet et deux plans latéraux, à 30° de part et d'autre. En partant d'une part du principe que le glissement dévié vers un plan (112)_F n'aurait pas la même facilité (ou difficulté) que celui vers un plan (112)_D ou encore que vers un plan (110) et que d'autre part dévier ne demande pas le même effort selon le plan que l'on quitte, les scalaires qui suffisaient à décrire le glissement dévié dans CFC doivent ici être remplacés par une matrice 3x3.

L'extension de la matrice des coefficients d'interactions aux systèmes de plans (112) et l'introduction d'une « matrice de coefficients de glissement dévié » sont les 2 principales extensions que ce travail a amené de faire sur le formalisme de la loi d'écroutissage du monocristal.

Les simulations réalisées apportent quelques éclairages intéressants à leur égard.

Nous avons d'autre part proposé le principe de la loi de Schmid régularisée au sens de Gambin-Arminjon [GAM 1991] qui offre une manière intéressante de coupler en tout ou en partie les systèmes de glissement que la loi de Schmid classique traite indépendamment les uns des autres, et ceci sans pour autant quitter le cadre principal de la loi de Schmid ni le cadre d'une loi écrouissage de type forêt. Nous avons en effet défendu (tel que reporté au **chapitre III**) qu'une forme partiellement régularisée qui rassemble les systèmes de glissement par ensembles colinéaires (donc en zones d'une même direction de glissement) permettait de traduire le principal effet de couplage entre plans collaborant au mouvement d'une famille donnée de dislocations dont une caractéristique majeure est une dissociation multi-planaire. Dans la mesure où seulement des essais de sollicitation uniaxiale et monotone ont eu à être simulés, l'examen de cette proposition reste à approfondir.

IV.4.a. Rappels des relations de modélisation et des conditions de simulation

Les conditions d'un essai in-situ de traction ou de compression simple d'axe x3 sont :

$$\sigma_{33} \neq 0, \quad \sigma_{ij \neq 33} = 0, \quad \dot{\epsilon}_{33}^T \approx \dot{\epsilon}_{33}^P = \dot{\epsilon} \quad (\text{IV.1})$$

Les conditions aux limites s'écrivent:

$$\text{En traction :} \quad \beta_{13}^T = \beta_{23}^T = \omega_{12}^T = 0 \quad (\text{IV.2a})$$

$$\text{En compression :} \quad \beta_{31}^T = \beta_{32}^T = \omega_{12}^T = 0 \quad (\text{IV.2b})$$

Le critère de plasticité complètement régularisé s'écrit :

$$F = \left(\sum_{i=1}^N \left(\frac{R_{33}^i \sigma_{33}}{\tau_c^i} \right)^n \right)^{1/n} - 1 = 0 \quad (\text{IV.3})$$

avec la relation de consistance $dF = 0$.

N est nombre des systèmes de glissement de la structure (N=12 pour CFC ils sont symétriques, et N=24 pour CC, dont 12 ne sont pas symétriques); τ_c^i est la cission critique du système de glissement i; R_{33}^i est la composante $e_3 \otimes e_3$ du tenseur de Schmid du système i;

n est un paramètre qui dépend de matériau et des conditions d'essais, il peut représenter une certaine dépendance en vitesse ou en température comme l'exposant de la loi viscoplastique mais il peut aussi représenter une certaine inter dépendance entre les systèmes de glissement.

La solution de l'équation (IV.3) est donnée par [GAM 1997]:

$$d\gamma^i = \left(\frac{\sigma_{33} R_{33}^i}{\tau_c^i} \right)^{n-1} \frac{1}{\tau_c^i} \lambda \quad (\text{IV.4})$$

λ est une constante appelée multiplicateur plastique qui est le seul paramètre à déterminer pour fixer les incréments de glissement et de rotation.

Si on applique une vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$ et en négligeant la déformation élastique on a

$$\dot{\varepsilon}_{33}^T \approx \dot{\varepsilon}_{33}^P = \dot{\varepsilon} = \sum_{i=1}^N R_{33}^i \dot{\gamma}^i \text{ ou en incréments:}$$

$$d\varepsilon_{33}^T = d\varepsilon_{33}^P = \sum_{i=1}^N R_{33}^i \left(\frac{\sigma_{33} R_{33}^i}{\tau_c^i} \right)^{n-1} \frac{1}{\tau_c^i} \lambda \quad (\text{IV.5})$$

Il vient alors :

$$\lambda = \frac{d\varepsilon_{33}^T}{\sum_{i=1}^N R_{33}^i \left(\frac{\sigma_{33} R_{33}^i}{\tau_c^i} \right)^{n-1} \frac{1}{\tau_c^i}} \quad (\text{IV.6})$$

Donc :

$$d\gamma^i = \left(\frac{\sigma_{33} R_{33}^i}{\tau_c^i} \right)^{n-1} \frac{\sigma_{33}}{\tau_c^i} d\varepsilon_{33}^T \quad (\text{IV.7})$$

La cission critique de la forêt a été proposée par Taylor sous la forme isotrope $\tau_c = \mu b \sqrt{\alpha \rho} + \tau_F$, avec τ_F la contrainte de Peierls. L'extension anisotrope est la forme quadratique [FRA 1984]:

$$\tau_c(i) = \mu b \sqrt{\sum_{j=1}^N \alpha_{ij} \rho_j} + \tau_F \quad (\text{IV.8})$$

avec α_{ij} la matrice d'interaction, ρ_j la densité de dislocation de système j .

α_{ij} dépend de la géométrie de la jonction, le code D.D peut nous donner des valeurs d'interaction pour les jonctions et les paires colinéaires.

Pour corriger l'effet de la tension de ligne sur les jonctions, [GOM 2006] a proposé la formule de correction de la matrice d'interaction :

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ij,ref} \left(0.2 + 0.8 \frac{\ln(b \sqrt{\alpha_{ij,ref} \rho_f})}{\ln(b \sqrt{\alpha_{ij,ref} \rho_{ref}})} \right)^2 \quad (\text{IV.9})$$

où $\alpha_{ij,ref}$ est la valeur d'interaction entre systèmes de glissement i et j à une densité de dislocation de référence ρ_{ref} , et α_{ij} est la valeur d'interaction à la densité ρ_f .

Les coefficients d'interaction dipolaire et coplanaire donnés par la DD sont très faibles. Cette valeur n'est pas compatible avec les résultats expérimentaux. Hoc [HOC 2004], et Queyreau [QUE 2008] ont montré que la valeur d'interaction dipolaire effective est la somme de la vraie valeur

d'interaction dipolaire et de la valeur d'un terme de glissements déviés du système de glissement principal. On peut estimer cette valeur selon une courbe de traction simple par exemple et on peut formellement l'écrire:

$$\alpha_{ii}^{eff} = \alpha_{ii}^{dipo} + \sum_j^{j \text{ col } i} k_{ij} \left(\frac{R_{33}^j}{R_{33}^i} \right)^2 \alpha_{ij}^{col} \quad (IV.10a)$$

$$\alpha_{ij}^{coplan} = \alpha_{ii}^{eff} \quad (IV.10b)$$

Les rapports $\left(\frac{R_{33}^j}{R_{33}^i} \right)^2$ représentent, dans le cas d'une sollicitation uniaxiale, le rapport des densités de

dislocations déviant à la densité primaire $\frac{\rho_d^j}{\rho^i} = \left(\frac{\tau^j}{\tau_c^i} \right)^2 = \left(\frac{R_{pq}^j \sigma_{pq}}{R_{pq}^i \sigma_{pq}} \right)^2$. Les coefficients k_{ij} proviennent

d'une matrice de base définissant les contributions des glissements déviés aux coefficients d'interaction dipolaire effectifs à laquelle nous reviendrons par la suite.

Si on omet la contrainte de Peierls, l'évolution du cisson critique s'écrit [Kocks et al. , Teodosiu et al.] :

$$d\tau_c^i = \frac{(\mu b)^2}{2\tau_c^i} \sum_{j=1,N} a^{ij} d\rho^j \quad (IV.11)$$

L'évolution de la densité de dislocation de chaque système de glissement est donnée par :

$$\frac{d\rho_i}{d\gamma^i} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L_i} - y_0 \rho_i \right) \quad (IV.12)$$

L_i est le libre parcours moyen, y_0 est une constante a ajuster sur une courbe expérimentale dans le stade final de restauration (saturation). Le libre parcours moyen s'écrit $\frac{1}{L_i} = k \frac{\tau_c^i}{b\mu}$

[KUB 2008] a proposée la formule suivante pour calculer le libre parcours moyen pour CFC quand on a crée des jonctions:

$$\frac{1}{L_f} = \frac{\tau_c^i}{\mu b K_{hkl}} \quad ; \quad K_{hkl} = \left[\frac{n^{act} \sqrt{a} (1+k)^{3/2}}{p_0 k_0 (n^{act} - 1 - k)} \right] \quad (IV.13)$$

où n^{act} est le nombre des systèmes de glissement actifs (n^{act} est toujours plus grand que 1 et ne décroît jamais), p_0, k_0, k sont des constantes. Pour le glissement double $K_{II} = 11$, et pour glissement simple, colinéaire, coplanaire $K_I = K_{copla} = K_{col} = 17K_{II}$

Le taux de stockage sans annihilation des dislocations s'écrit finalement :

$$\frac{d\rho_i}{d\gamma^i} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L_f} + \frac{\sqrt{\alpha_{dipolaire}\rho_i}}{K_I} + \frac{\sum_{j \in copla(i)} \sqrt{\alpha_{copla}\rho_j}}{K_{copla}} \right) \quad (IV.14)$$

Le taux d'annihilation des dislocations est défini dans le sens classique [ESS 1979], par l'inversion du libre parcours moyen $(\delta\rho / \delta\gamma)_s = -1/bL_s$

Au **stade I**, l'annihilation des dislocations est négligeable, elle prend un rôle important en fin de stade II lorsque le taux d'érouissage passe de linéaire à parabolique en **stade III**. On montre que cette annihilation par système est proportionnelle à la densité de dislocations du système. Le coefficient de proportionnalité y^{hkl} dépend de l'orientation et de la cission critique τ_{III} d'entrée en **stade III**. On a typiquement $y^{hkl} = 0.5nm$ [DEV 2008].

La forme finale pour le bilan de stockage, compte tenu des annihilations devient donc:

$$\frac{d\rho_i}{d\gamma^i} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L_f} + \frac{\sqrt{\alpha_{dipolaire}\rho_i}}{K_I} + \frac{\sum_{j \in copla(i)} \sqrt{\alpha_{copla}\rho_j}}{K_{copla}} - y^{hkl} \rho_i \right) \quad (IV.15)$$

Dans notre cas du fer alpha ARMCO, quelques analyses MET par D. Caillard ont montré l'existence de précipités (carbure,..). S. Queyreau [QUE 2010] a montré que les carbures augmentent la cission critique et le taux stockage de dislocations. La cission critique s'écrit avec un terme supplémentaire :

$$\tau_C(i) = \mu b \sqrt{\sum_{j=1}^N \alpha_{ij} \rho_j} + \tau_F + \tau_P \quad (IV.16)$$

tandis que le taux de stockage des dislocations devient:

$$\frac{d\rho_i}{d\gamma^i} = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L_f} + \frac{\sqrt{\alpha_{dipolaire}\rho_i}}{K_I} + \frac{\sum_{j \in copla(i)} \sqrt{\alpha_{copla}\rho_j}}{K_{copla}} - y^{hkl} \rho_i \right) + \frac{r\pi^2 N_p}{2b} \quad (IV.17)$$

où r est le rayon des précipités et N_p la densité des précipités par unité d'aire.

IV.4.b. Les paramètres du modèle et le schéma d'implémentation de la modélisation.

Sur la base des équations précédemment rappelées, un code a été implémenté dans MATLAB pour la réalisation de simulations numériques à comparer aux résultats expérimentaux. Ce code a été entièrement écrit dans le cadre de ce travail.

Les principaux paramètres à fixer sont la matrice des coefficients d'interaction entre paires de systèmes de glissement et les coefficients de glissement dévié.

- La matrice des coefficients d'interaction entre paires de systèmes de glissement a_{ij} .

La matrice des coefficients d'interaction entre paires de systèmes de glissement n'est pas encore connue actuellement, du moins pour ce qui concerne les paires de systèmes de plans (112) ou les paires mixtes (110)-(112). Nous utilisons les valeurs moyennes données par la DD en ce qui concerne les paires de systèmes de plans (110) et nous les extrapolons dans un premier temps aux autres types de paires de systèmes. Ensuite, selon les coefficients mis en jeu dans les différents essais réalisés, nous ajusterons si nécessaire ces coefficients.

La contrainte de Peierls pour le fer alpha à température ambiante est de l'ordre de 5MPa [SPI 1970]. C'est la valeur utilisée dans nos calculs.

Une estimation de la quantité des obstacles de type carbures dans nos monocristaux de Fer alpha à partir des images MET de D. Caillard nous donne une densité $N_p \approx 0.5 * 10^{12} m^{-2}$, un diamètre $D \approx 30nm \rightarrow 50nm$ et donc une contrainte de durcissement de 5MPa environ pour un taux de stockage de dislocations $J = 5 * 10^{14} m^{-2}$.

Les 24 systèmes de glissement impliqués sont rappelés dans le tableau ci-après, dans la notation inversée de Schmid et Boas telle qu'introduite dans [FRA 1983] et reprise dans [MAD 2004].

Indice	Plan	b	Indice	Plan	b
2A	(0-11)	[-111]	1C	(011)	[-1-11]
3A	(101)	[-111]	3C	(101)	[-1-11]
6A	(110)	[-111]	5C	(-110)	[-1-11]
2B	(0-11)	[111]	1D	(011)	[1-11]
4B	(-101)	[111]	4D	(-101)	[1-11]
5B	(-110)	[111]	6D	(110)	[1-11]

Indice	Plan	b	Indice	Plan	b
2'A	(211)	[-111]	1'C	(2-11)	[-1-11]
3'A	(12-1)	[-111]	3''C	(-121)	[-1-11]
6'A	(1-12)	[-111]	5''C	(112)	[-1-11]
2''B	(-211)	[111]	1''D	(21-1)	[1-11]
4'B	(1-21)	[111]	4''D	(121)	[1-11]
5'B	(11-2)	[111]	6''D	(-112)	[1-11]

Tableau IV.13 : Rappel des notations des 24 systèmes de glissement.

Il en résulte la matrice des coefficients d'interactions suivante, d'après [MAD 2004] :

	2A	3A	6A	2B	4B	5B	1C	3C	5C	1D	4D	6D	2'A	3'A	6'A	2''B	4'B	5'B	1'C	3''C	5''C	1''D	4''D	6''D	
2A	DP	Ω_1	Ω_1	CP	B1	B1	A	B1	C	A	C	B1	Ω_2	Ω_3	Ω_3	B2	B3	B3	D	E	F	D	F	E	
3A		DP	Ω_1	B1	A	C	B1	CP	B1	C	A	B1		Ω_2	Ω_3	E	D	F	B3	B2	B3	F	D	E	
6A			DP	B1	C	A	C	B1	A	B1	B1	CP			Ω_2	E	F	D	F	E	D	B3	B3	B2	
2B				DP	Ω_1	Ω_1	A	C	B1	A	B1	C				Ω_2	Ω_3	Ω_3	D	F	E	D	E	F	
4B					DP	Ω_1	C	A	B1	B1	CP	B1					Ω_2	Ω_3	F	D	E	B3	B2	B3	
5B						DP	B1	B1	CP	C	B1	A						Ω_2	B3	B3	B2	F	E	D	
1C							DP	Ω_1	Ω_1	CP	B1	B1							Ω_2	Ω_3	Ω_3	B2	B3	B3	
3C								DP	Ω_1	B1	A	C								Ω_2	Ω_3	E	D	F	
5C									DP	B1	C	A									Ω_2	E	F	D	
1D										DP	Ω_1	Ω_1										Ω_2	Ω_3	Ω_3	
4D											DP	Ω_1											Ω_2	Ω_3	
6D												DP												Ω_2	
2'A													DP	Ω_1	Ω_1	G	I	I	H	I	J	H	J	I	
3'A														DP	Ω_1	I	H	J	I	G	I	J	H	I	
6'A															DP	I	J	H	J	I	H	I	I	G	
2''B																DP	Ω_1	Ω_1	H	J	I	H	I	J	
4'B																	DP	Ω_1	J	H	I	I	G	I	
5'B																		DP	I	I	G	J	I	H	
1'C																			DP	Ω_1	Ω_1	G	I	I	
3''C																				DP	Ω_1	I	H	J	
5''C																						DP	I	J	H
1''D																							DP	Ω_1	Ω_1
4''D																								DP	Ω_1
6''D																									DP

Tableau IV.14: Matrices d'interaction selon Madec et al [MAD 2004]

Une version couleur de cette matrice a été rapportée au **chapitre I**.

Les coefficients calculés par simulations DD pour les systèmes de plans (110) sont au nombre de 5 tels que rapportés dans le tableau suivant d'après [MAD 2004].

Les valeurs publiées montrent que l'interaction colinéaire est la plus forte $\alpha^{col} \approx 0,7$

Les valeurs pour les interactions de type jonctions sont de l'ordre de $\alpha^{jnc} \approx 0,07$

Les 3 types distincts de jonction (symétrique, asymétrique et coin) ont des coefficients peu différents. Nous ignorerons ces différences ici.

L'interaction dipolaire (sans correction de glissements déviés) est la plus faible : $\alpha^{dip} \approx 0.007$

Interaction nature	Coefficients β	a (This work)	a (From Madec and Kubin, 2004)
Collinear	0.53 ± 0.04	0.72	0.55
Symmetrical junction	0.063 ± 0.006	0.09	0.06
Asymmetrical junction	0.036 ± 0.006	0.05	0.04
Edge junction	0.039 ± 0.005	0.06	0.045
Dipolar and coplanar interactions	0.0068 ± 0.001	–	–

Tableau IV.15: Les valeurs d'interactions pour le glissement (110) des cristaux CC [QUE 2009].

En l'absence d'informations sur les différences en sens facile et difficile de glissement sur les plans (112), les coefficients d'interaction sont a priori considérés comme identiques dans les deux sens.

Cet a priori sera par la suite corrigé en fonction des besoins de l'accord simulation/expérience.

Nous verrons que ce sont les coefficients d'interaction dipolaire effectifs de la matrice qui seront à ajuster principalement et que c'est au travers de la matrice des coefficients de glissement dévié que des effets d'asymétrie vont être introduits dans nos simulations.

- La matrice des coefficients de glissement dévié k_{ij} -

Les coefficients k_{ij} dans l'équation (IV.10a) proviennent d'une matrice de base définissant les contributions des glissements déviés aux coefficients d'interaction dipolaire effectifs. Cette matrice de base dépend des types de systèmes de glissement de la structure et des types de systèmes de glissement dévié associés à chaque type de système.

Dans la structure CFC, chaque système de glissement, qui sont tous du même type, n'a qu'un seul système de glissement dévié, cette matrice de base se réduit donc à un coefficient scalaire unique et il en va de même pour la matrice k_{ij} .

Dans la structure CC, si on considère seulement les plans (110) chaque système aura 2 plans possibles de glissement dévié. S'agissant de systèmes de glissements d'un même type et de systèmes de glissement déviés d'un même type également, la matrice de base n'a toujours qu'un seul

coefficient mais la matrice k_{ij} a une ligne et 2 colonnes (2 termes dans la somme de l'équation 10a) soit la dimension 1x2. Si on considère les plans (110) et les plans (112), chaque système de glissement de l'un ou l'autre type est associé à 5 systèmes de glissement déviés, 2 du même type que le système de glissement et 3 de l'autre type. La matrice de base est alors de dimension 2x2 et la matrice k_{ij} de dimension 2x5 (5 termes dans la somme de l'équation 10a).

Si de surcroît on distingue les plans (112) de sens facile F ou difficile D, aux 3 types de systèmes de glissement sont toujours associés 5 systèmes de glissement dévié répartis en 3 types, ce qui conduit à une matrice de base de dimension 3x3 pour une matrice k_{ij} de dimension 3x5.

On note ainsi que lors de sollicitations simples aboutissant à du glissement double ou triple au maximum, seul un petit nombre de coefficients de la grande matrice d'interactions jouent un rôle dans l'estimation de l'érouissage, parmi lesquels le terme d'interaction dipolaire (le terme diagonal d'auto-érouissage) est prépondérant. En revanche, ce terme dipolaire *effectif* peut à lui seul impliquer jusqu'à 6 termes distincts, le coefficient dipolaire pur, faible voire négligeable devant les autres, et jusqu'à 5 coefficients de glissement dévié. C'est-à-dire que toute la matrice k_{ij} est impliquée dans les essais les plus simples, ce qui constitue au total au moins autant de coefficients ayant un rôle significatif que les coefficients d'interactions de paires de dislocations eux-mêmes.

Il n'est donc pas surprenant qu'il ait fallu ajuster ces termes k_{ij} pour l'ensemble des essais réalisés dans la mesure où chaque essai ne faisait intervenir de manière sensible que quelques (parfois un seul) coefficients d'interactions.

Cette matrice k_{ij} pour la simulation numérique de nos essais a été construite par réajustements successifs sur l'ensemble d'essais types qui ont été expérimentalement présentés précédemment. Les essais de traction ont été principalement retenus pour ces comparaisons dans la mesure où les conditions aux limites des essais de compressions sont moins assurées.

Dans cette matrice, sur chaque ligne correspondant à un type de système de glissement, plus le coefficient de déviation vers un type de système dévié est petit, moins le glissement dévié sur ce type de système (de plan) est facile.

En particulier, pour ce qui concerne les systèmes asymétriques de plans (112), il paraît légitime de considérer que :

- un glissement dévié provenant d'un système quel que soit son type sera plutôt plus aisé lorsque le système vers lequel la déviation s'effectue est sollicité en sens facile que lorsqu'il est sollicité en sens difficile ;

- quel que soit le type de système vers lequel un glissement dévié s'effectue, ce glissement dévié sera plutôt plus aisé s'il provient d'un plan (112) sollicité en sens difficile que s'il provient d'un plan (112) sollicité en sens facile ;
- l'aptitude à la déviation sera la même chaque fois que le système vers lequel le glissement dévié s'effectue est de même type que le système dont cette déviation provient.

Rappelons que c'est le signe de la cission résolue qui décide du sens de mobilité sur un système donné.

La troisième considération peut s'appliquer à tout type de système et permet donc de supposer un coefficient identique pour les 3 transitions de (112)F vers (112)F, de (112)D vers (112)D et de (110) vers (110). Ce coefficient définit l'ensemble des 3 termes diagonaux de la matrice de base 3x3 caractérisant la matrice k_{ij} .

Si une hiérarchisation des coefficients de glissement dévié semble pouvoir s'établir assez aisément pour la famille des systèmes asymétriques de plans (112), notamment par rapport au coefficient diagonal de référence, c'est le positionnement dans cette hiérarchie des coefficients impliquant les systèmes de plans (110) qui s'avère le plus délicat.

Nous présentons ci-après cette matrice de base (3x3) telle que l'ensemble des essais confrontés nous a permis de l'estimer, à l'appui de quelques déductions raisonnables qui seront synthétisées dans la discussion finale de ce chapitre.

		Système de glissement dévié		
		(112)F	(110)	(112)D
Système actif	(112)F	0.015	0.01	0.005
	(110)	0.02	0.015	0.01
	(112)D	0.03	0.018	0.015

Tableau IV.16 : Matrice de base 3x3 des coefficients de glissement dévié pour les glissements sur plans (110) et (112) dans les cristaux CC.

Selon ce tableau, une dislocation d'un plan (110) déviara plus facilement sur un plan (112)F que sur un plan (112)D, la déviation sur un autre plan (110) en zone étant d'aptitude intermédiaire. De même, une dislocation en mouvement sur un plan (112) sens difficile (resp. facile) aura une plus grande (resp. plus faible) aptitude à dévier sur les différents types de plans que si elle vient d'un plan (110), pour une même hiérarchie des 3 types possibles de déviations.

D'après l'équation (IV.10a), il est clair que les coefficients dipolaires effectifs résultant de la matrice k_{ij} ne sont pas constants mais varient avec l'orientation de la sollicitation, comme cela a été discuté au chapitre III.

Toutefois, nous avons constaté en comparant les calculs que le grand nombre (5) de systèmes de glissements déviés rend la variation en orientation assez faible. Ces constatations autorisent en première approximation de prendre des valeurs fixes pour les coefficients dipolaires effectifs des 3 grands types de systèmes de glissement dévié de plan (110), (112)F et (112)D. Ces valeurs constantes auxquelles nous avons abouti sont rapportées dans le tableau ci-après.

	(112)F	(110)	(112)D
α_{eff}^{dip}	0.02	0.03	0.036

Tableau IV.17 : Approximation des coefficients dipolaires effectifs pour les glissements sur plans (110) et (112) dans les cristaux CC.

Une part d'asymétrie selon le sens facile ou difficile du glissement sur les plans (112) apparaît donc portée par ces coefficients d'interaction dipolaires effectifs, par l'intermédiaire de la matrice des coefficients de glissement dévié qui s'y manifeste.

Les coefficients d'interaction dipolaire concernant les situations de dislocations se déplaçant sur des plans parallèles (aux glissements déviés près), ils s'appliquent aux interactions entre dislocations d'un même système ainsi qu'aux interactions entre dislocations de systèmes coplanaires. Il n'y a qu'un seul système de glissement par plan (112), mais il y a 2 systèmes coplanaires pour chaque plan (110). Il y a donc un coefficient d'interaction dipolaire effectif s'appliquant à cette interaction coplaire.

Après avoir constaté que l'utilisation du coefficient dipolaire effectif de 0.03 retenu pour les systèmes de plan (110) conduisait à l'activation inobservée du système coplaire au système principal, nous avons utilisé la valeur d'interaction coplaire $\alpha^{cop} \approx 0.07$ pour éviter l'activation du système de glissement coplaire, c'est-à-dire la même valeur que la valeur commune utilisée pour les interactions de type coin, jonction symétrique et jonction asymétrique.

- Le schéma d'implémentation de la modélisation

Le schéma d'implémentation utilisé est présenté dans l'organigramme ci après.

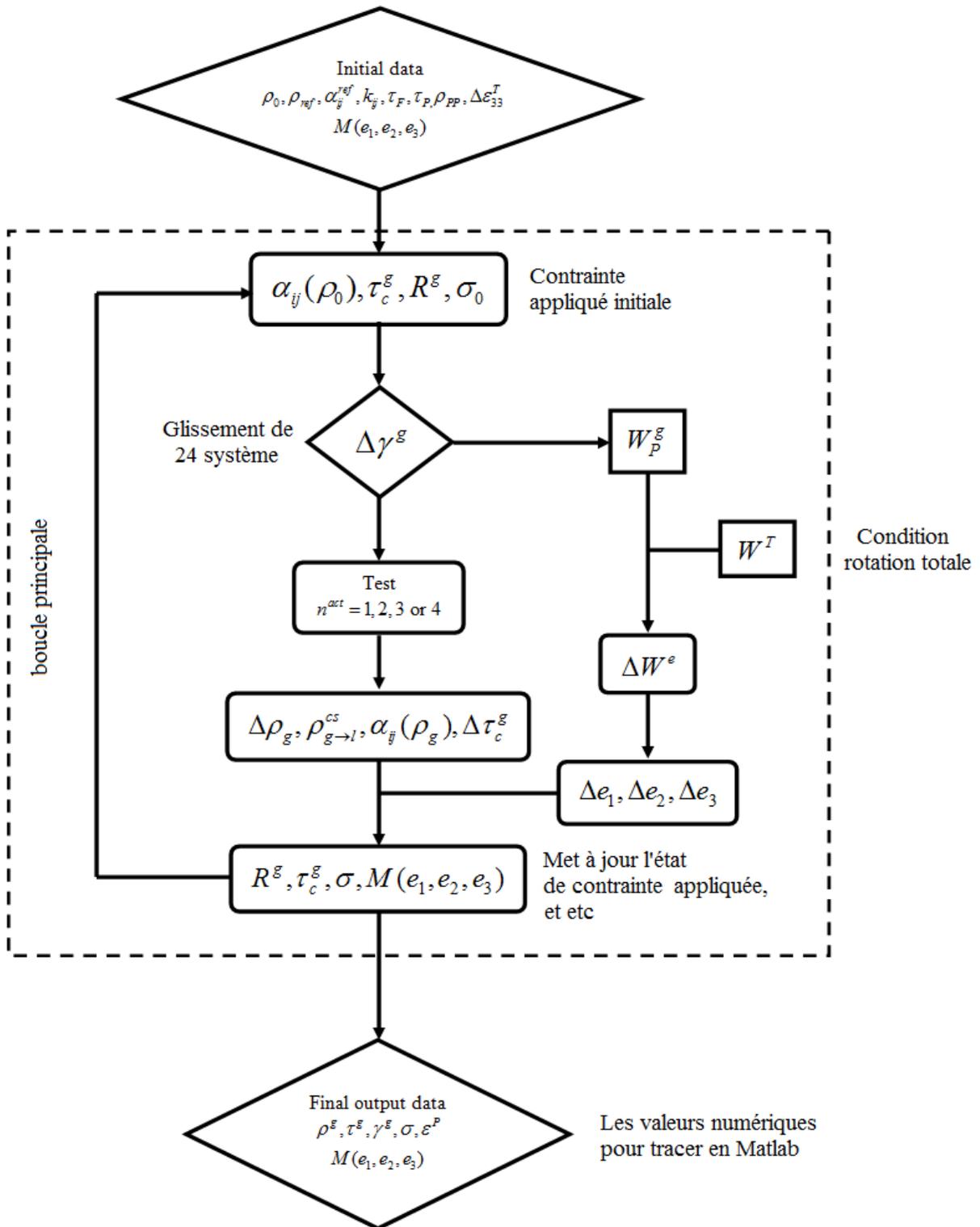


Tableau IV.18: Organigramme de l'implémentation numérique de la modélisation

On applique un incrément de déformation $\Delta\varepsilon_{33}^T$ selon les conditions aux limites de traction ou de compression rappelées dans la partie précédente. En supposant que la loi de comportement local décrit correctement la réponse globale du monocristal on suppose les essais parfaitement homogènes ce qui est bien sur excessif, davantage pour les essais de compression que pour les essais de traction. Les cas de comportement expérimental manifestement hétérogène ne peuvent être analysés précisément de la sorte. Quelques informations et indications utiles peuvent néanmoins être obtenues dans certains cas.

Pour chaque essai simulé, on a fixé la densité initiale de dislocations du monocristal de manière à ce que le seuil de plasticité de la simulation coïncide avec le seuil expérimentalement obtenu.

Rappelons que les éprouvettes ne proviennent pas d'un unique grand monocristal, mais de monocristaux différents soient issus d'un même multicristal à gros grains soient issus de différents multicristaux n'ayant pas connu strictement la même histoire thermomécanique.

En fonction de cette densité initiale de dislocations, les coefficients d'interaction entre paires de systèmes de glissement sont modifiés à chaque cas pour tenir compte du terme de tension de ligne.

Cette densité est élevée pour nos monocristaux et il en résulte un écrouissage de glissement simple en général plus élevé que dans les essais de la littérature sur monocristaux recuits pour restauration préalable aux essais. Les équations prennent également en compte une densité réaliste de précipités présents et une contrainte de Peierls également réaliste pour le fer alphas à température ambiante.

Le reste de la modélisation utilise le cadre théorique issu de la Dynamique des Dislocations tel qu'appliqué aux cristaux cubiques CFC et CC dans un contexte de loi de Schmid pleinement régularisée, qui diffère peu dans les situations confrontées à la loi partiellement régularisée proposée et discutée au **chapitre III**.

Une originalité de la modélisation est la prise en compte d'une matrice de coefficients de glissement dévié, telle qu'introduite dans la section précédente.

IV.4.c. Présentation des résultats de simulation

Les simulations s'efforcent à reproduire la courbe contrainte-déformation expérimentale et la rotation cristalline mesurée par EBSD sur les 3 faces des éprouvettes.

La limite élastique est ajustée en fixant pour chaque essai la densité de dislocation initiale appropriée dans la simulation. Elles sont précisées pour chaque essai dans le tableau récapitulatif des paramètres de l'essai.

On note que globalement, les densités ajustées aux cissions critiques expérimentales sont bien de l'ordre de la densité mesurée par diffraction X (T. Chauveau) qui est de $3.6 \cdot 10^{13} \text{ m}^{-2}$.

Les simulations peuvent ensuite être traitées en courbe cisson- glissement sur le système primaire observé. Elle procure également diverses informations sur 'l'apparition éventuelle d'un second système et sur l'évolution des densités de dislocations principales associées.

Pour chaque type d'essai, seuls quelques coefficients de la matrice d'interaction sont impliqués. Ce sont ceux qui concernent les systèmes principaux : primaire et secondaire(s) actifs et ceux de facteurs de Schmid élevé qui participent à l'écroutissage. En revanche l'ensemble des coefficients de glissement dévié intervient dans l'expression même approximée du coefficient dipolaire effectif du système principal.

Typiquement, dans le cas glissement simple, on peut dire en simplifiant que le taux d'écroutissage initial est proportionnel à la valeur d'interaction dipolaire effective du glissement principal. Et le retard de glissement secondaire est fixé par le rapport des valeurs d'interaction du système de glissement secondaire et du système de glissement principal.

Nous reportons les simulations de 4 situations de glissement (110) traction et compression, de 3 situations de glissement (112)F traction et compression et de 4 situations de glissement (112)D traction et compression.

Nous reportons pour le glissement sur plans (110) symétriques des simulations d'essais de traction et d'essais de compression le comportement étant censé montrer un écroutissage analogue, aux différences dues à la géométrie près. Concernant les systèmes de plans (112), les comparaisons sont compliquées par le fait que traction et compression dans un même sens F ou D ne s'obtiennent pas dans la même zone cristalline et donc dans un même environnement, que le chapitre III a montré très influent.

Les simulations en situation de glissement sur plans (110)

Essai de traction (110) - 1

	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 1 0]	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 1 0]	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 2 1]	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 2 -1]
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 1 0]	Dipolaire effectif 0.03	Coin 0.07	Colinéaire 0.7	Asymétrique 0.07
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 1 0]		Dipolaire effectif 0.03	Asymétrique 0.07	Colinéaire 0.7
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 2 1] (D)			Dipolaire effectif 0.036	Symétrique 0.07
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 2 -1] (D)				Dipolaire effectif 0.036
$J_0=0.2^E 12 \ m^{-2}$	$J(pp)=5^E 14 \ m^{-2}$	Nact=1	$Y_0=0.05^E -9$	

Tableau IV.19 : Valeurs des coefficients d'interaction des systèmes de glissement principaux

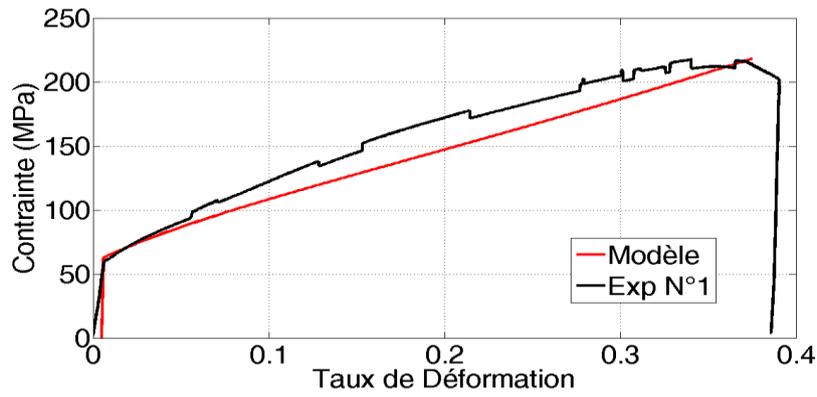


Figure IV.39 : Simulation de la courbe contrainte-déformation

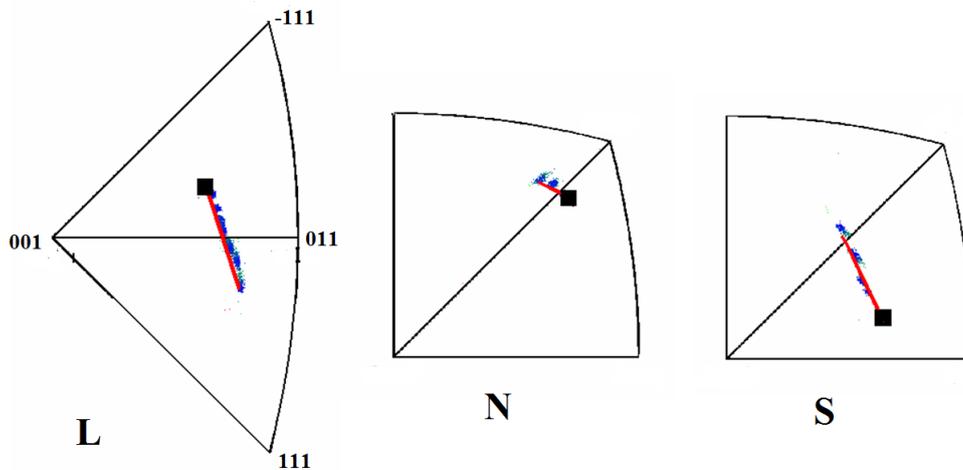


Figure IV.40 : Simulation de la rotation cristalline

L'hypothèse de glissement simple (110) avec les conditions aux limites usuelles d'essai de traction reproduit très bien les rotations des 3 axes du cristal et correctement le niveau d'écroutissage en ayant pris la densité de dislocations correspondant à la limite d'élasticité, et en ayant ajusté les coefficients d'interaction conformément. On peut souligner que l'interaction dominante dans cet essai est l'orientation de type coin entre le système primaire et le système non colinéaire de même type (110) qui devient le plus sollicité après overshoot. La valeur de 0.07 attribué à l'ensemble des interactions de type jonction convient notamment pour restituer la seconde partie de la courbe tandis que pour la première partie, les coefficients dipolaires effectifs utilisés sont ceux déterminés pour les plans (110) principalement et les plans (112)D secondairement (qui n'ont pas d'effet significatif). Nous pouvons donc tracer quelques caractéristiques du glissement simple. La courbe cisssion glissement ne traduit que la variation du facteur de Schmid principal tandis que la courbe de glissement et de densité associée de dislocations montre que l'activation secondaire est tardive, confirmant ainsi l'overshoot élevé observé.

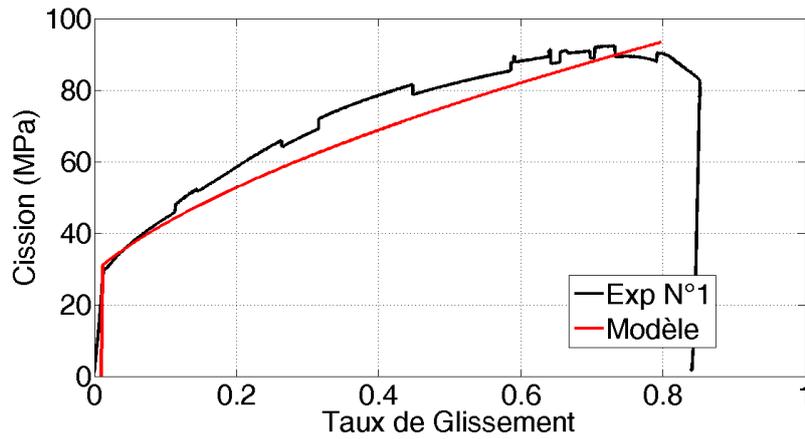


Figure IV.41 : Simulation de la courbe cission-glissemment

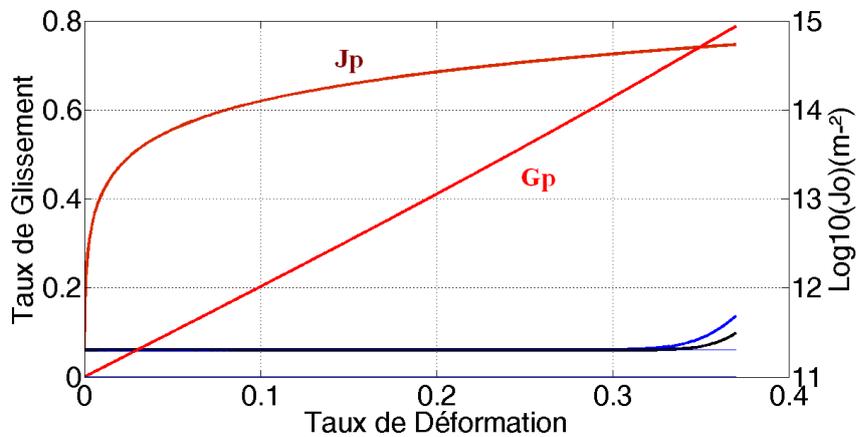


Figure IV.42 : Simulation des glissements et densités de dislocation des systèmes principaux

Essai de traction (110) - 2 :

	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 1 0]	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 1 0]	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 2 1]	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 2 -1]
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 1 0]	Dipolaire effectif 0.03	Coin 0.07	Colinéaire 0.7	Asymétrique 0.07
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 1 0]		Dipolaire effectif 0.03	Asymétrique 0.07	Colinéaire 0.7
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 2 1]			Dipolaire effectif 0.036	Symétrique 0.07
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 2 -1]				Dipolaire effectif 0.036
$J_0=0.15^E12 \ m^{-2}$	$J(pp)=5^E14$	$N_{act}=1$	$Y_0(GS)=0.15^E-9$	$Y_0(GD)=5^E-9$

Tableau IV.20 : Valeurs des coefficients d'interaction des systèmes de glissement principaux

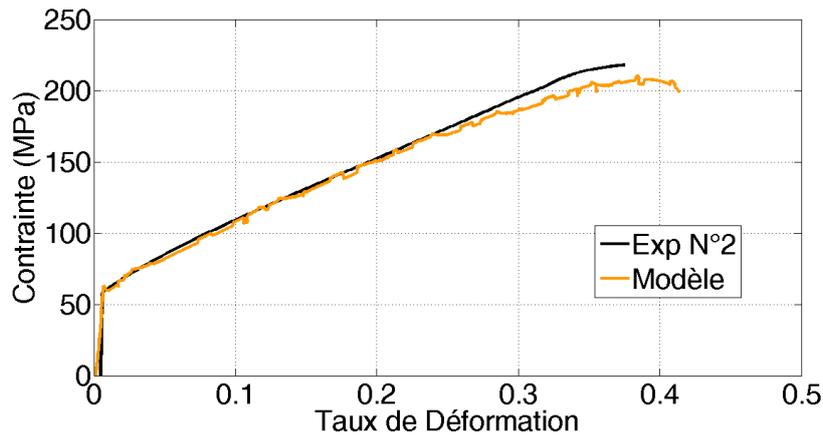


Figure IV.43 : Simulation de la courbe contrainte-déformation

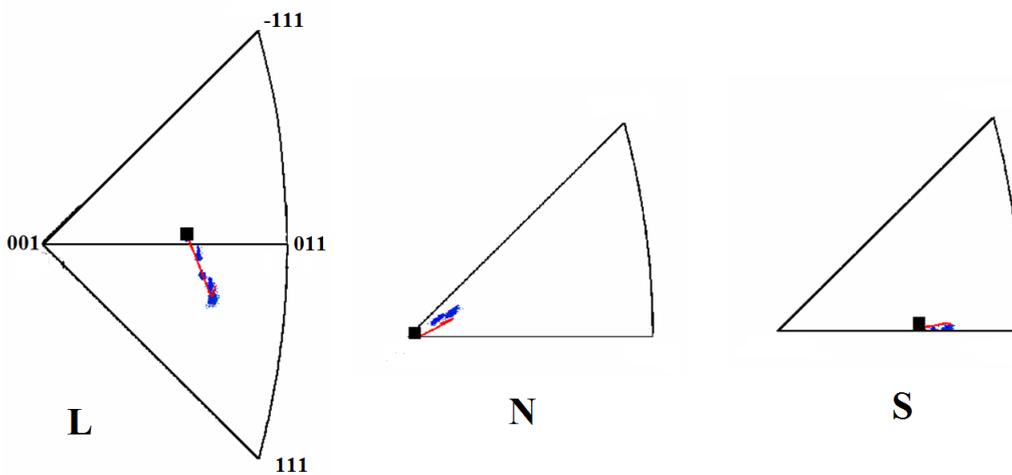


Figure IV.44 : Simulation de la rotation cristalline

Les systèmes impliqués et donc les coefficients d'interactions principaux sont les mêmes que pour l'essai n°1. La simulation de glissement simple reproduit très bien dans ce cas également les rotations mesurées alors que l'orientation est très proche de la zone de symétrie. Elle reproduit également très bien la courbe de traction (le **stade III** n'est pas examiné car il ne consiste qu'à introduire (**équations IV.15, IV.17**) un coefficient γ qui garde une grande part d'ajustabilité) avec une densité initiale de dislocations un peu inférieure à celle de l'essai n°1.

La courbe cission-glissement est également très bien reproduite, et l'on observe que le système secondaire apparaît à peut près à la même quantité de glissement primaire que dans l'essai n°1.

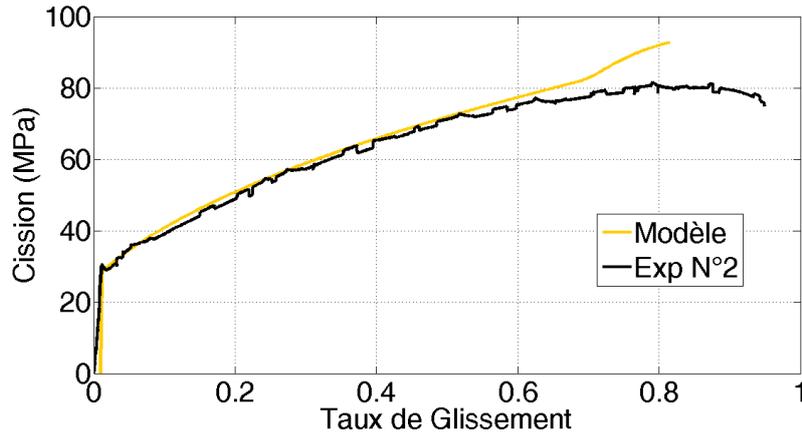


Figure IV.45 : Simulation de la courbe cission-glissement

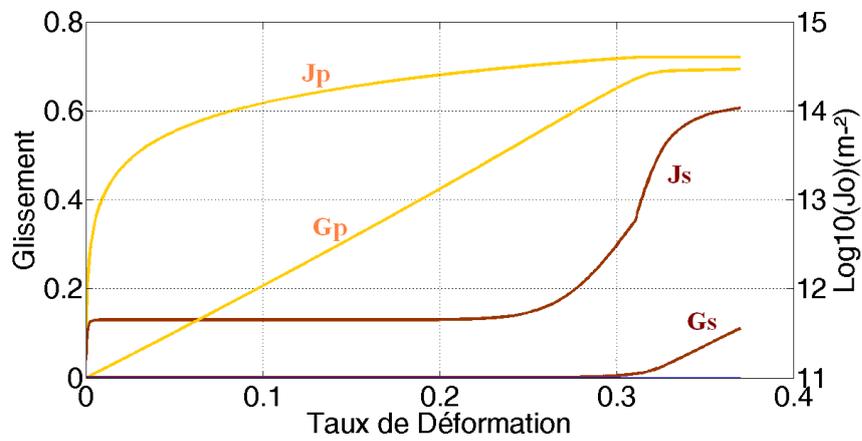


Figure IV.46 : Simulation des glissements et densités de dislocation des systèmes principaux

Essai de traction (110) - 3 :

	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 0 \ 1]$	$\langle 1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[0 \ 1 \ 1]$
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 0 \ 1]$	Dipolaire effectif 0.03	Symétrique 0.07
$\langle 1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[0 \ 1 \ 1]$		Dipolaire effectif 0.03
$J_0=0.3^E 12 \ m^{-2}$	$J(pp)=5^E 14 \ m^{-2}$	Nact = 2 $Y_0=0.4^E -9$

Tableau IV.21 : Valeurs d'interaction des systèmes de glissement principaux

Cet essai instable qui part très proche d'une zone de symétrie $\langle 001 \rangle \langle 111 \rangle$ considère un nombre $n=2$ de systèmes principaux au sens des cisssions résolues subies, ce qui doit être pris en compte selon les résultats de DD pour correctement traduire le niveau d'écroutissage. Les fortes cisssions sur plusieurs systèmes créent en effet une forte multiplication de dislocations avant le seuil de glissement macroscopique ce qui a pour résultat de réduire le libre parcours moyen des dislocations ultérieurement mobiles. Ceci indépendamment du fait que le glissement se poursuive ensuite ou non en glissement simple ou double.

Dans le cas présent, une première simulation faite dans l'hypothèse de glissement simple dès le seuil initial de plasticité suffit à bien décrire les rotations observées dans la partie principale du cristal (l'essai est hétérogène) hormis la rotation de la face latérale. La courbe cisssion-glissement en découle directement et aucun système secondaire n'est activé là où le primaire domine.

Une 2ème simulation du même essai est reportée dans l'hypothèse où le glissement serait double et stable au début et deviendrait instable après une « certaine » déformation.

Les résultats de cette 2ème simulation sont reportés sur les **figures IV.51 à IV.54**.

Elles montrent que si la rotation est meilleure (notamment pour la direction latérale qui semble bien indiquer une première étape de glissement double, la courbe contrainte-déformation s'éloigne de la courbe expérimentale et les évolutions associées de glissement et de densité de dislocations sont bien sur différentes.

A noter que pour l'orientation de cet essai, la principale interaction de jonction intervenant dans le taux d'écroutissage est la jonction symétrique.

1ère simulation dans l'hypothèse de glissement simple dès le seuil initial

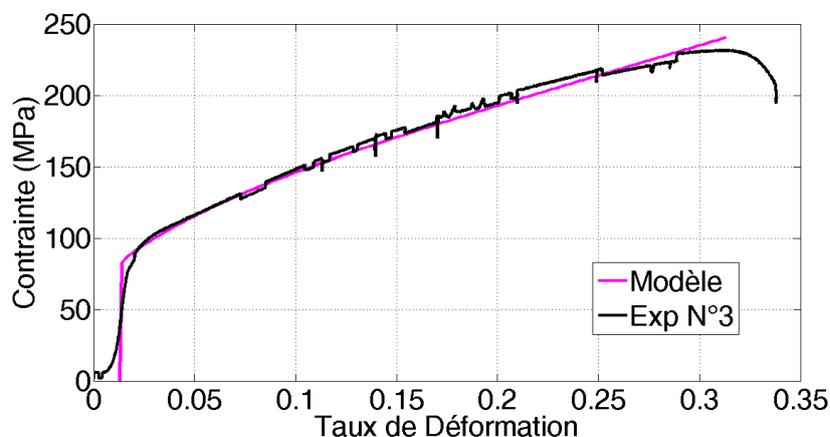


Figure IV.47 : Simulation de la courbe contrainte-déformation

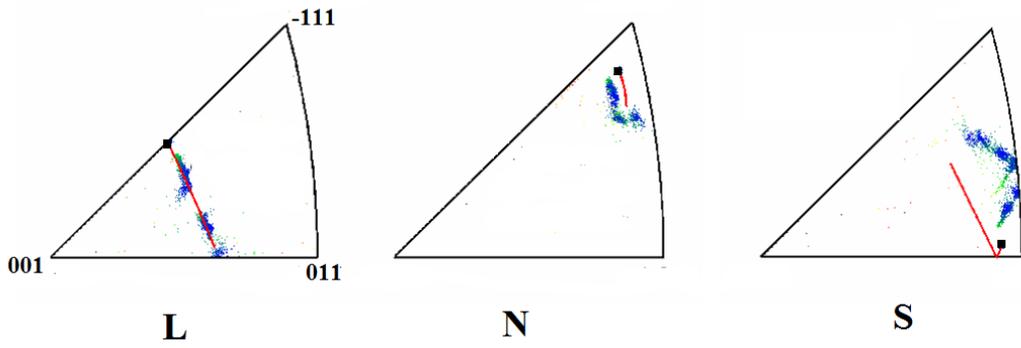


Figure IV.48 : Simulation de la rotation cristalline

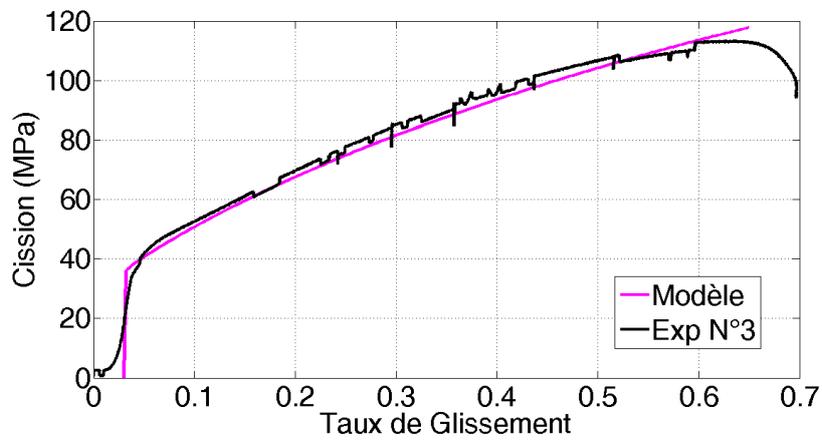


Figure IV.49 : Simulation de la courbe cission-glissement

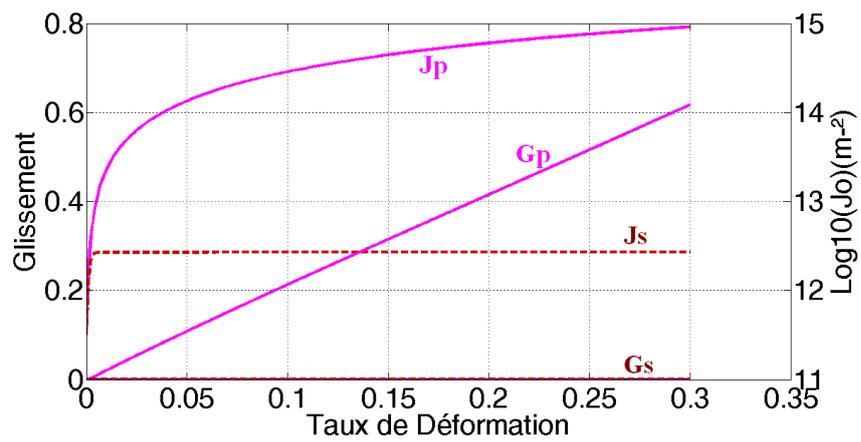


Figure IV.50 : Simulation des glissements et densités de dislocation des systèmes principaux

2eme simulation dans l'hypothèse d'un glissement double restant stable sur $\langle 001 \rangle$ - $\langle -111 \rangle$

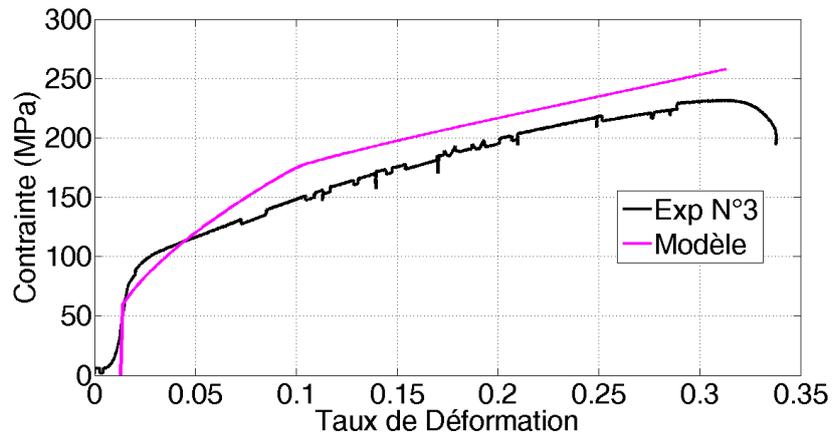


Figure IV.51 : Simulation de la courbe contrainte-déformation

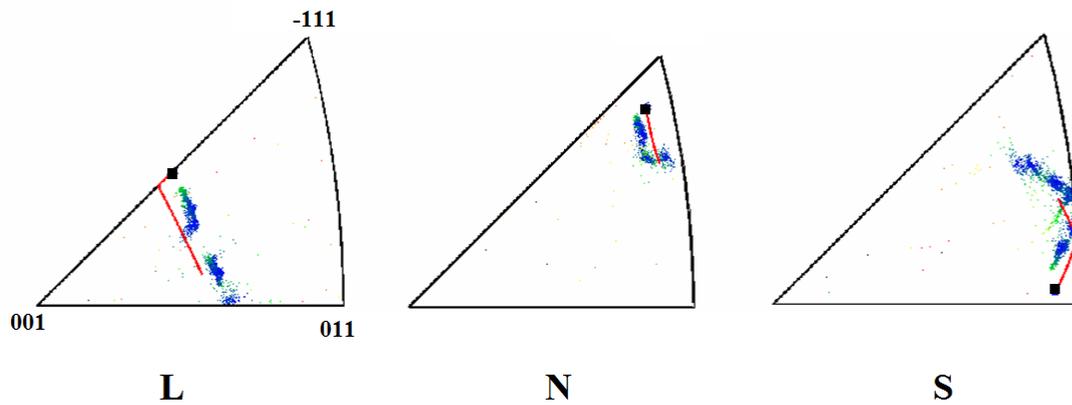


Figure IV.52 : Simulation de la rotation cristalline

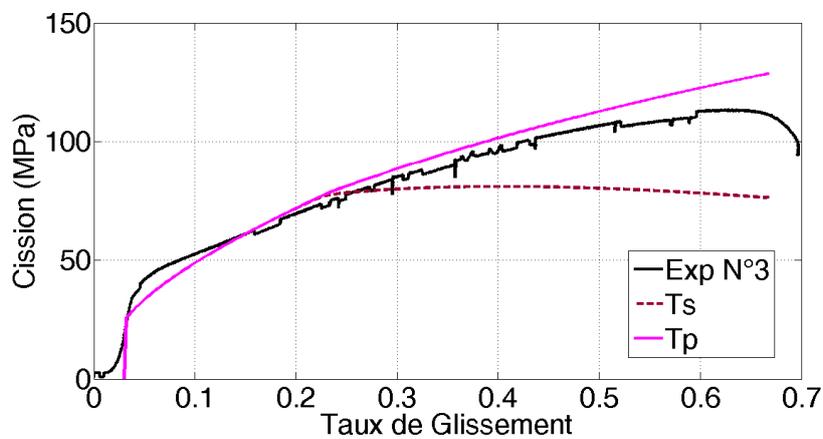


Figure IV.53 : Simulation de la courbe cission-glissement

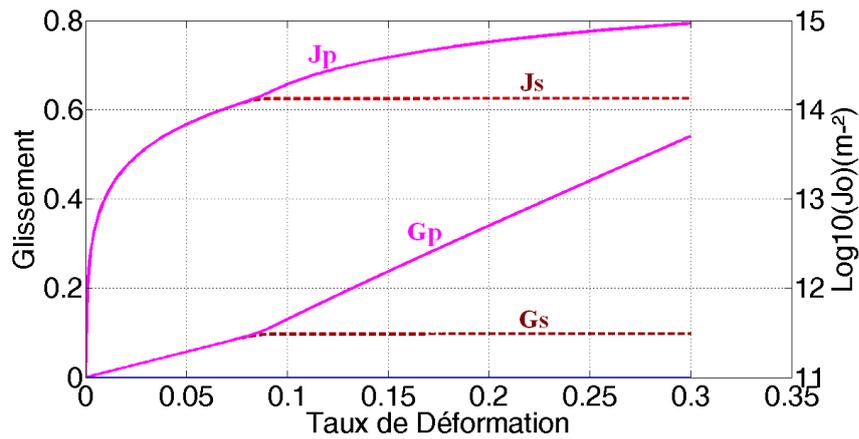


Figure IV.54 : Simulation des glissements et densités de dislocation des systèmes principaux

Essai de compression (110) – 1

	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 1 0]	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 1 0]	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 2 1]	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 2 -1]
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 1 0]	Dipolaire effectif 0.03	Coin 0.07	Colinéaire 0.7	Asymétrique 0.07
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 1 0]		Dipolaire effectif 0.03	Asymétrique 0.07	Colinéaire 0.7
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 2 1] (F)			Dipolaire effectif 0.02	Symétrique 0.07
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 2 -1] (F)				Dipolaire effectif 0.02
$J_0=0.17^E 12 \ m^{-2}$	$J_{(pp)}=5^E 14 \ m^{-2}$	$N_{act}=1$	$Y_0(GS)=0.05^E -9$	

Tableau IV.22 : Valeurs des coefficients d'interaction des systèmes de glissement principaux

Les essais de compression sont plus difficiles à simuler dans une hypothèse de comportement homogène et pour des conditions aux limites théoriques associées. On constate néanmoins sur cet essai, fait avec la densité initiale de dislocations correspondant à la limite élastique et en prenant les coefficients d'interactions corrigés en conséquence, la rotation en glissement simple (110) est plutôt bien restituée et le taux d'écroutissage également. On ne voit pas dans cet essai l'amorce d'un glissement secondaire.

Les coefficients dipolaires effectifs principaux sont ceux des plans (110) et les secondaires ceux des plans (112)F, mais ces derniers n'ont pas d'effet significatif.

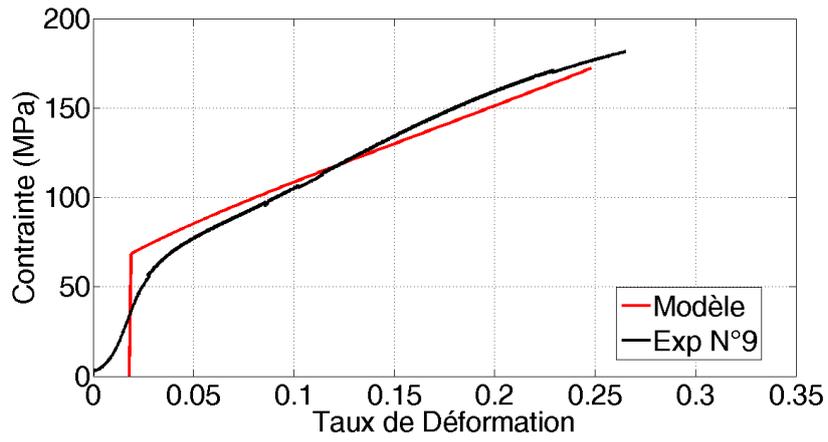


Figure IV.55 : Simulation de la courbe contrainte-déformation

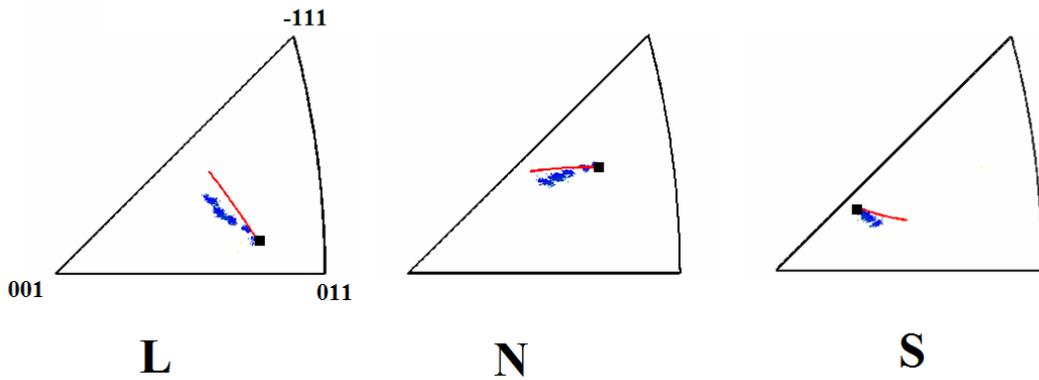


Figure IV.56 : Simulation de la rotation cristalline

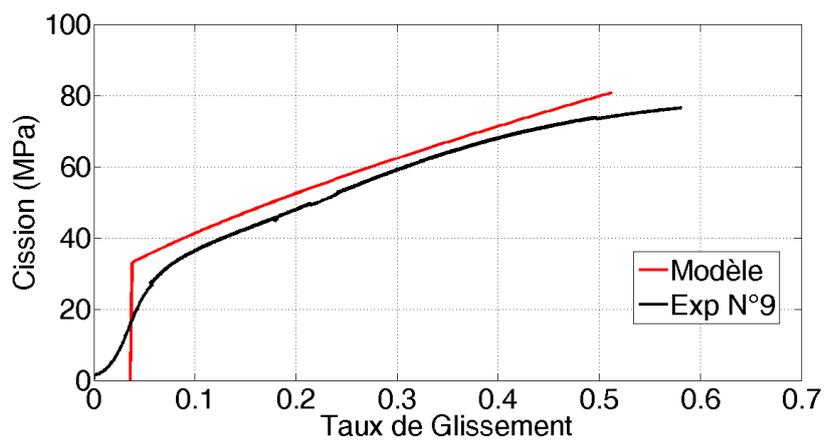


Figure IV.57 : Simulation de la courbe cission-glisement

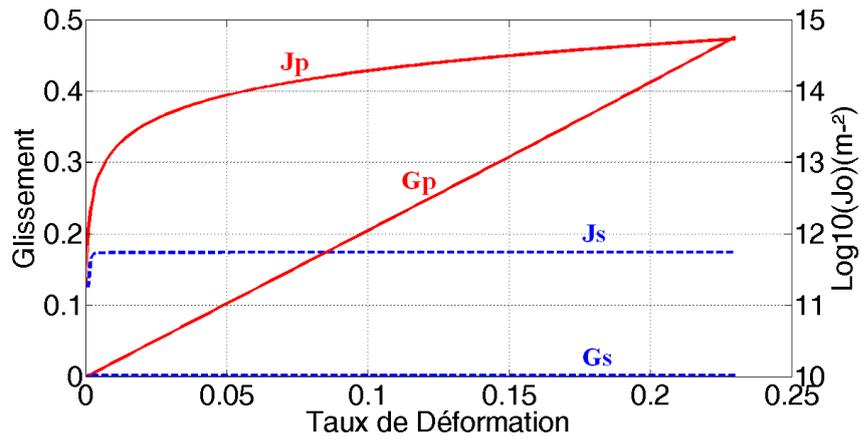


Figure IV.58 : Simulation des glissements et densités de dislocation des systèmes principaux

Au total, ces 4 essais où le glissement de type (110) est le principal actif ont été raisonnablement représentés en utilisant le formalisme de la DD avec des coefficients d'interactions ajustés sur des densités de dislocations initiale en bon accord avec la mesure dans nos monocristaux et un coefficient dipolaire effectif pour le glissement (110) égal à 0.02. Un seul coefficient de type jonction égal à 0.07 a été utilisé, et un coefficient de 0.7 pour les interactions colinéaires.

Les simulations en situation de glissement sur plans (112) F

Essai de traction (112)F - 1

	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 1 \ 2]$	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[1 \ -1 \ 2]$	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[0 \ -1 \ 1]$	$\langle 1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[-1 \ 0 \ 1]$
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 1 \ 2]$ (F)	Dipolaire effectif 0.02	Symétrique 0.07	Symétrique 0.07	Symétrique 0.07
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[1 \ -1 \ 2]$ (F)		Dipolaire effectif 0.02	Colinéaire 0.7	Asymétrique 0.07
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[0 \ -1 \ 1]$			Dipolaire effectif 0.03	Symétrique 0.07
$\langle 1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[-1 \ 0 \ 1]$				Dipolaire effectif 0.03
$J_0=0.2^E \ 12 \ m^{-2}$	$J(pp)=5^E \ 14 \ m^{-2}$	Nact=1	$Y_0=0.1^E \ -9$	

Tableau IV.23: Valeurs d'interaction des systèmes de glissement principaux

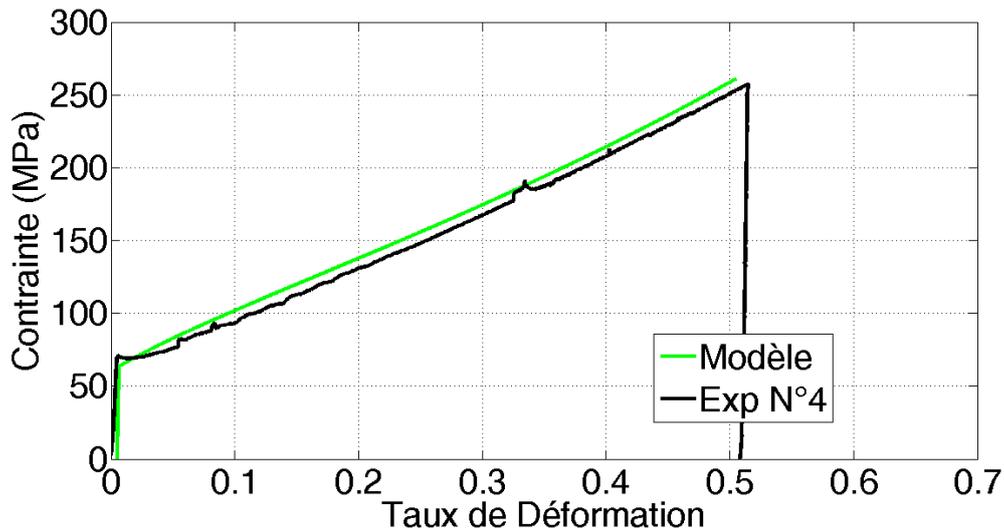


Figure IV.59 : Simulation de la courbe contrainte-déformation

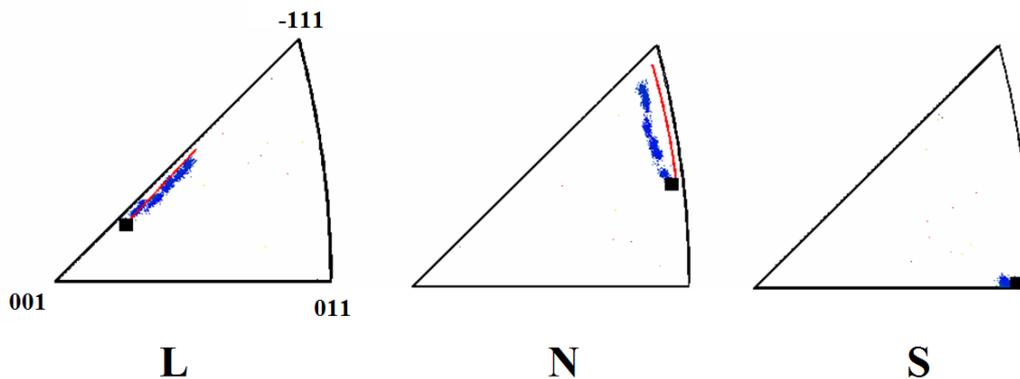


Figure IV.60 : Simulation de la rotation cristalline

L'hypothèse de glissement simple sur un plan (112) restituée, avec les coefficients d'interaction concernés et ajustés pour la densité de dislocations qui donne la limite élastique mesurée, parfaitement à la fois la rotation cristalline et la courbe contrainte-déformation. Il en résulte la courbe de cisaillement qui apparaît moins linéaire, du fait de la variation du facteur de Schmid et aucun glissement secondaire ne se déclenche jusqu'à la fin de l'essai.

L'ensemble des coefficients d'interaction produisant cette simulation est le même que pour les simulations précédentes en glissement (110). C'est donc le coefficient dipolaire effectif pour les systèmes de plan (112) pris de valeur 0.02 qui suffit à cette simulation.

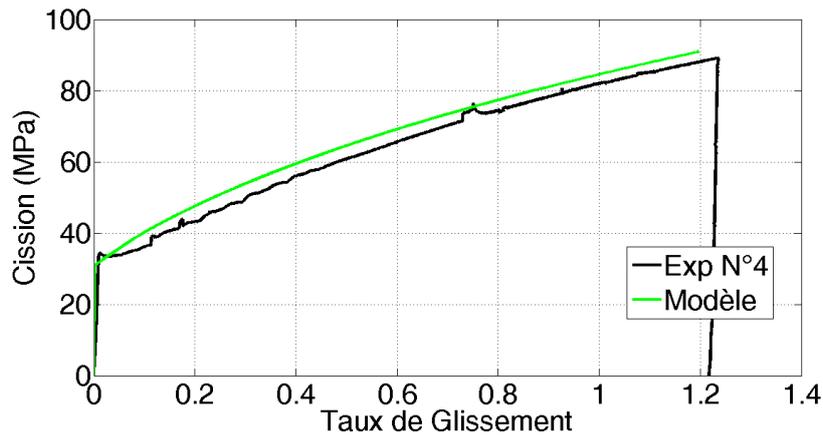


Figure IV.61 : Simulation de la courbe cisssion-glissemment

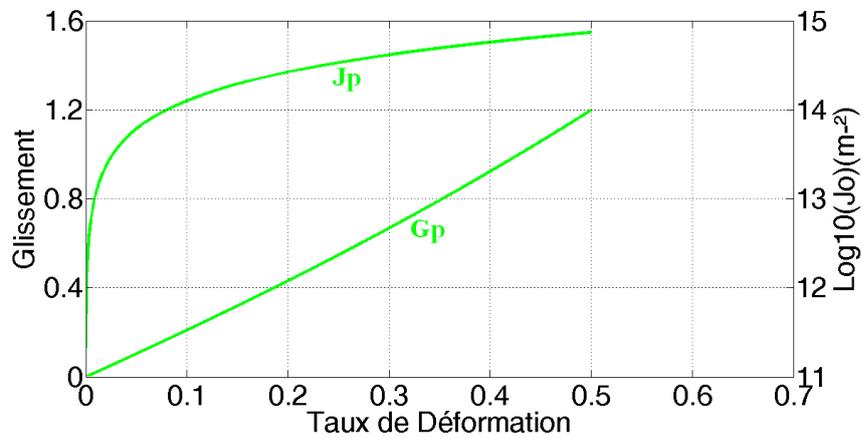


Figure IV.62 : Simulation des glissements et densités de dislocation des systèmes principaux

Essai de traction (112)F - 2 :

	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[1 \ -1 \ 2]$	$\langle 1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 1 \ -2]$	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 1 \ 2]$	$\langle 1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[-1 \ 1 \ 2]$
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[1 \ -1 \ 2]$ (F)	Dipolaire effectif 0.02	Symétrique 0.07	Symétrique 0.07	Symétrique 0.07
$\langle 1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 1 \ -2]$ (F)		Dipolaire effectif 0.02	Symétrique 0.07	Symétrique 0.07
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 1 \ 2]$ (F)			Dipolaire effectif 0.02	Symétrique 0.07
$\langle 1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[-1 \ 1 \ 2]$ (F)				Dipolaire effectif 0.02
$J_o=0.13^E12 \ m^{-2}$	$J(pp)=5^E14$	Nact=2	$Y0=0.25^E-9$	

Tableau IV.24: Valeurs d'interaction des systèmes de glissement principaux

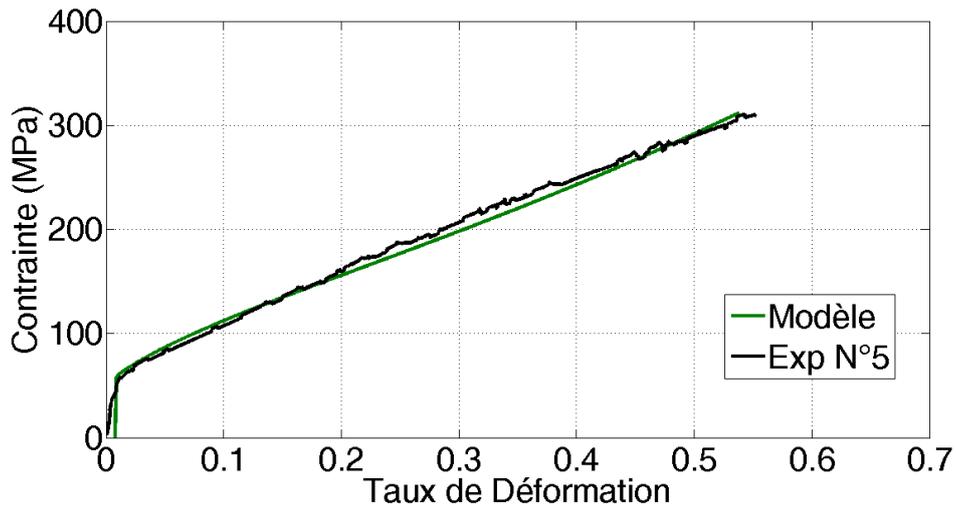


Figure IV.63 : Simulation de la courbe contrainte-déformation

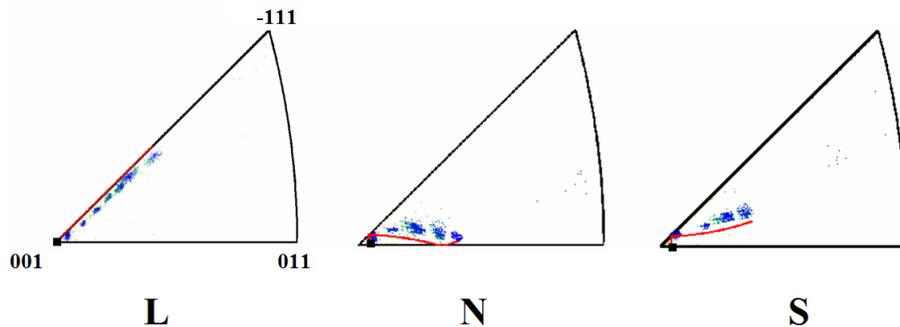


Figure IV.64 : Simulation de la rotation cristalline

La direction $\langle 001 \rangle$ est très sensible. Le comportement peut changer fortement pour de petits écarts à l'orientation idéale, selon le nombre n de systèmes de glissement qui subiront des cisssions résolues identiques : 1, 2, 3 or 4. Dans le cas présent, le taux d'écroutissage ainsi que la rotation associée sont très bien reproduits si on suppose $n=2$ et que néanmoins la déformation s'effectue en glissement simple. Aucun nouveau coefficient n 'est impliqué dans cette simulation.

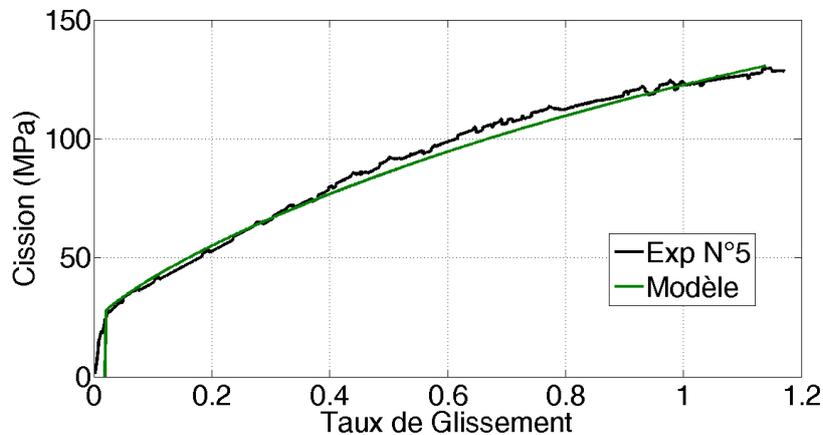


Figure IV.65 : Simulation de la courbe cission-glissemment

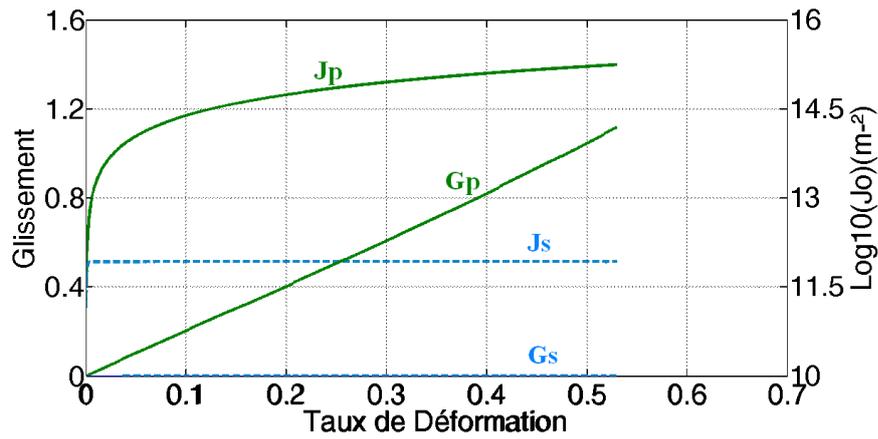


Figure IV.66 : Simulation des glissements et densités de dislocation des systèmes principaux

Essai de compression (112)F - 1 :

	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 1 0]	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 1 0]	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 2 1]	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 2 -1]
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 1 0]	Dipolaire effectif 0.03	Coin 0.07	Colinéaire 0.7	Asymétrique 0.07
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 1 0]		Dipolaire effectif 0.03	Asymétrique 0.07	Colinéaire 0.7
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 2 1] (F)			Dipolaire effectif 0.02	Symétrique 0.07
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 2 -1] (F)				Dipolaire effectif 0.02
$J_0 = 0.2^{E12} \ m^{-2}$	$J(pp) = 5^{E14} \ m^{-2}$	Nact=1	$Y_0(GS) = 0.05^{E-9}$	

Tableau IV.25: Valeurs d'interaction des systèmes de glissement principaux

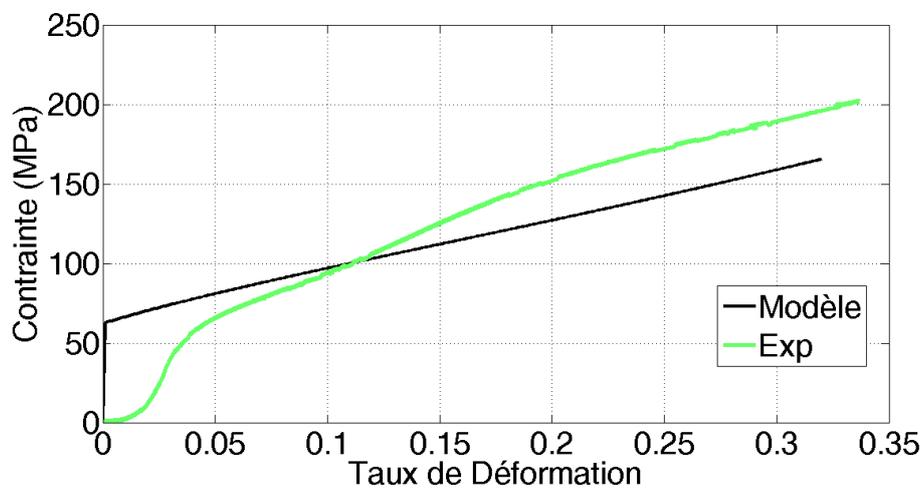


Figure IV.67 : Simulation de la courbe contrainte-déformation

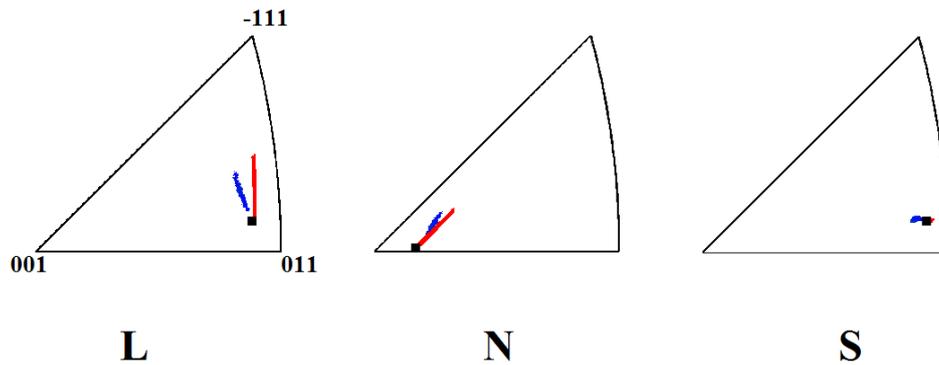


Figure IV.68 : Simulation de la rotation cristalline

Pour cet essai de compression le résultat de la simulation numérique dans l'hypothèse de glissement simple ne reproduit pas précisément le résultat expérimental. Sauf à considérer que l'essai est plus défectueux que les autres essais de même type (compression), c'est l'un des essais les moins satisfaisant pour lequel le jeu de coefficients qui jusque là a fonctionné globalement bien semble en défaut, car il n'y a aucun coefficient nouvellement impliqué pour cette orientation. Mais des conditions aux limites éloignées de la situation idéale peuvent aussi justifier ces désaccords, ce qui ne conduit pas à invalider le jeu de coefficients retenu.

La courbe de simulation de contrainte-déformation reproduit quand même le taux d'écroutissement final de la courbe expérimentale, de même que la courbe cission-glissement résultant de l'hypothèse de glissement simple.

Ce cas aurait mérité un second test expérimental ce qui n'a pas pu être entrepris faute de cristal disponible avec l'orientation requise.

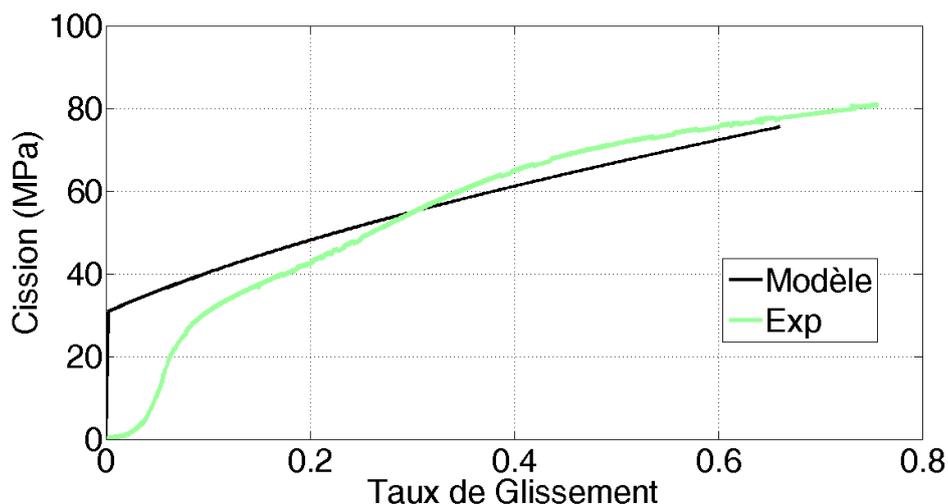


Figure IV.69 : Simulation de la courbe cission-glissement principal

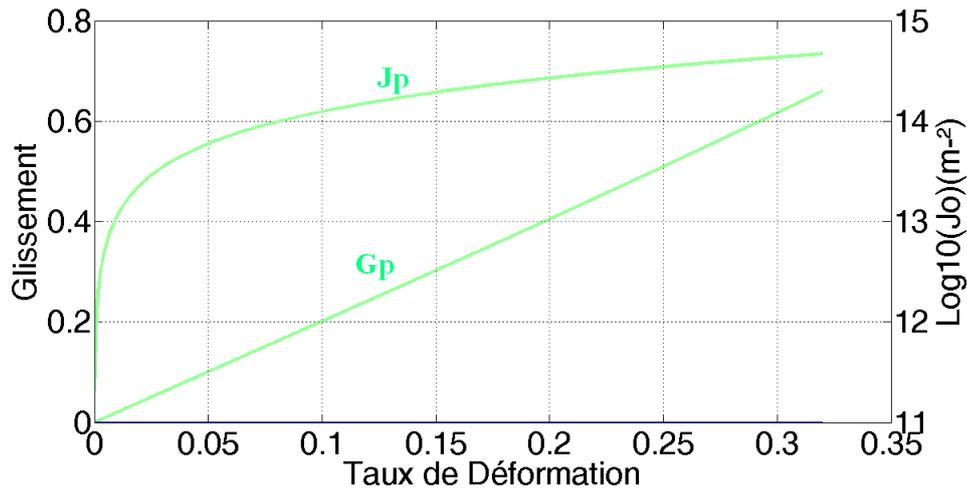


Figure IV.70 : Simulation des glissements et densités de dislocation des systèmes principaux

Au total, cette seconde série de simulations, pour des situations de glissement sur plans (112)F, a été réalisée en n'introduisant en plus des coefficient déjà introduits pour le glissement (110) qu'un coefficient d'interaction dipolaire effectif pour les systèmes de plan (112)F, de valeur 0.02, plus faible que celle du coefficient des systèmes de plans (110), égale à 0.03. L'essai de compression n'est pas très bien reproduit avec ces conditions mais la bonne et même très bonne représentation des 2 essais de traction conduit à considérer l'essai de compression comme non probant d'une quelconque invalidité du jeu de coefficients utilisé. Cet essai est à reproduire si l'opportunité s'en présente.

Les simulations en situation de glissement sur plans (112)D

Essai de traction (112)D -1 (R=0,5) :

	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 1 0]	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 1 0]	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 2 1]	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 2 -1]
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 1 0]	Dipolaire effectif 0.03	Coin 0.07	Colinéaire 0.7	Asymétrique 0.07
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 1 0]		Dipolaire effectif 0.03	Asymétrique 0.07	Colinéaire 0.7
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 2 1] (D)			Dipolaire effectif 0.036	Symétrique 0.07
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 2 -1] (D)				Dipolaire effectif 0.036
$J_0=0.3^E 12 \ m^{-2}$	$J(pp)=5^E 14 \ m^{-2}$	Nact=1	$Y_0(GS)=0.15^E -9$	$Y_0(GD)=5^E -9$

Tableau IV.26: Valeurs d'interaction des systèmes de glissement principaux

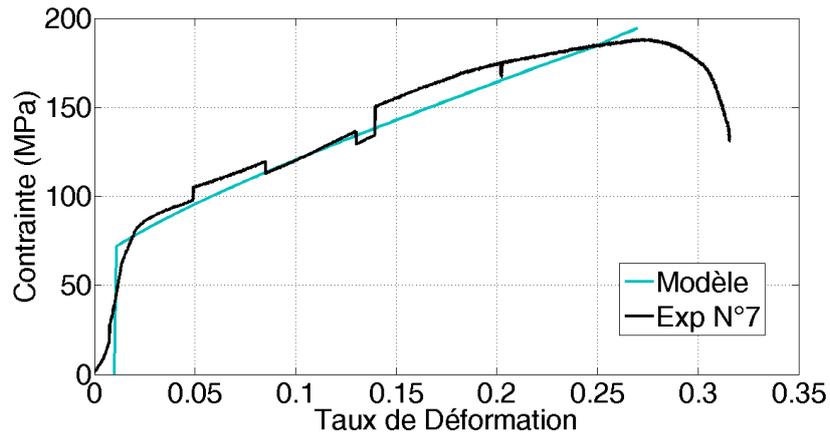


Figure IV.71 : Simulation de la courbe contrainte-déformation

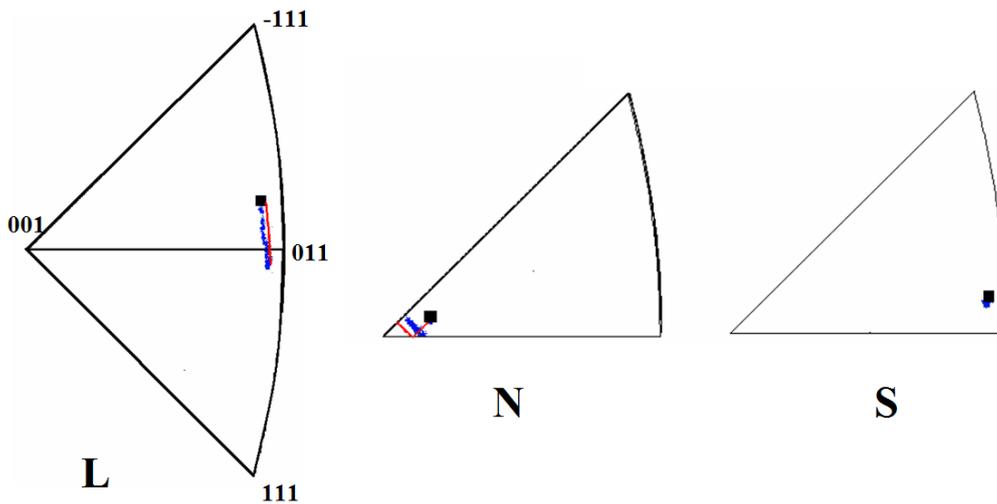


Figure IV.72 : Simulation de la rotation cristalline

L'hypothèse de glissement simple sur le système principal $(112)D$ restitue bien la rotation et le niveau d'écroutissage pour les coefficients retenus et ajustés pour la densité de dislocations initiale appropriée. Le coefficient effectif dipolaire pour le système principal de plan $(112)D$, de valeur 0.036, est le seul nouveau coefficient dans cette simulation, en comparaison aux situations précédentes.

La courbe de glissement indique que le système secondaire commence à s'activer.

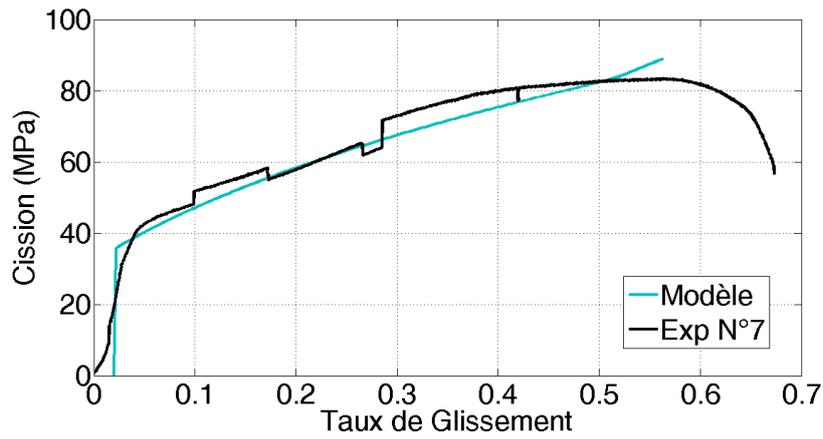


Figure IV.73 : Simulation de la courbe cission-glisement

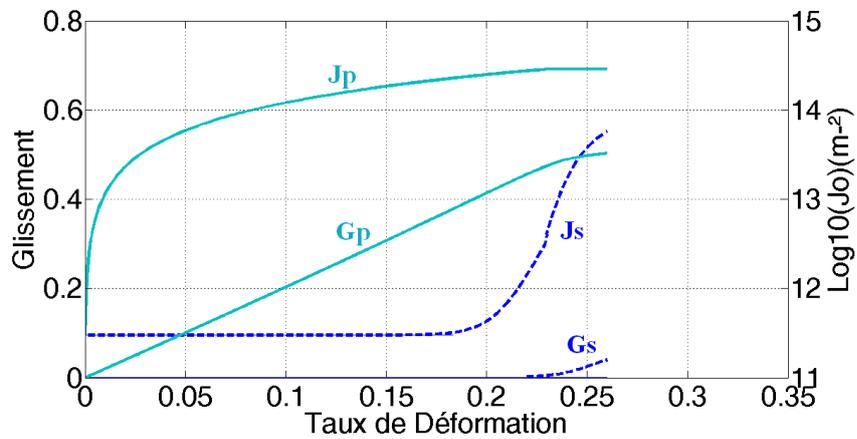


Figure IV.74 : Simulation des glissements et densités de dislocation des systèmes principaux

Essai de traction (112)D – 2 (axe <011>) :

	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[-1 \ 1 \ 0]$	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 1 \ 0]$	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[-1 \ 2 \ 1]$	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 2 \ -1]$
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[-1 \ 1 \ 0]$	Dipôlaire effectif 0.03	Coin 0.07	Colinéaire 0.7	Asymétrique 0.07
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 1 \ 0]$		Dipôlaire effectif 0.03	Asymétrique 0.07	Colinéaire 0.7
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[-1 \ 2 \ 1]$			Dipôlaire effectif 0.036	Symétrique 0.07
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 2 \ -1]$				Dipôlaire effectif 0.036
$J_0 = 0.2 \cdot 10^{12} \ m^{-2}$	$J(pp) = 5 \cdot 10^{14} \ m^{-2}$	Nact=2	$Y_0 = 3.5 \cdot 10^{-9}$	

Tableau IV.27: Valeurs d'interaction des systèmes de glissement principaux

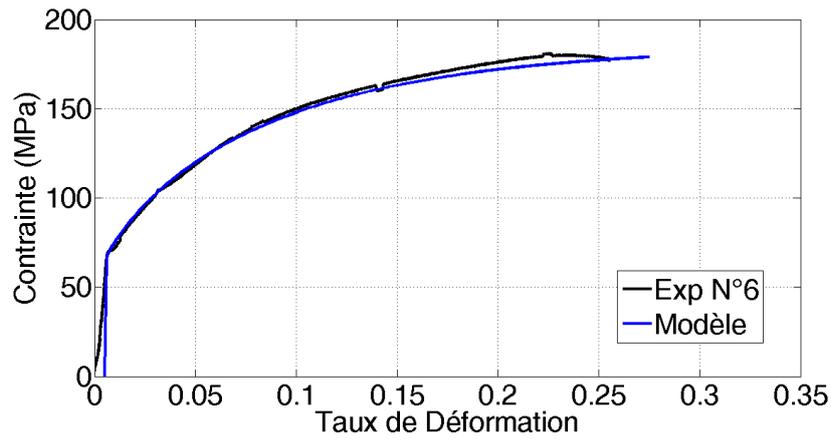


Figure IV.75 : Simulation de la courbe contrainte-déformation

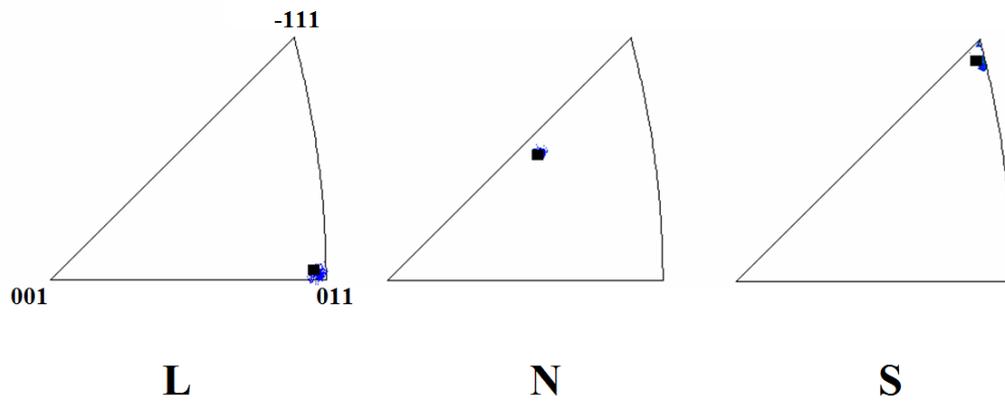


Figure IV.76 : simulation de la rotation cristalline

Pour cette orientation, la stabilité de l'axe indique que les 2 directions participent. La simulation en glissement double symétrique (112)D reproduit bien la stabilité d'orientation et la courbe d'écrouissage. La courbe est plus parabolique que celles des cas de glissement simple. Les coefficients utilisés sont bien les mêmes que ceux de l'essai précédent, pour la densité initiale de dislocation correspondant à la limite élastique de cet essai.

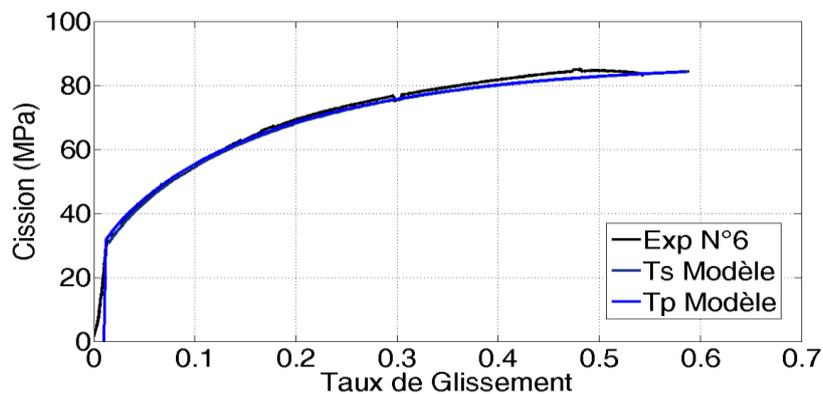


Figure IV.77 : Simulation de la courbe cisssion-glisement double

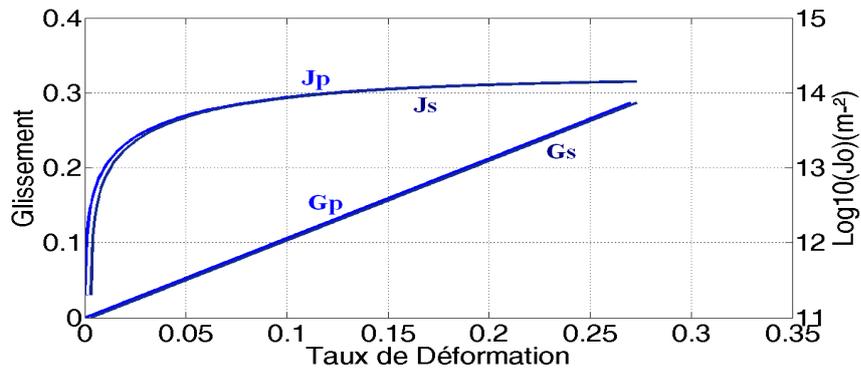


Figure IV.78 : Simulation des glissements et densités de dislocation des systèmes principaux

Essai de traction (112)D-3 axe <111> :

	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[2 \ 1 \ 1]$	$\langle 1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 2 \ 1]$	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 1 \ 2]$
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ $[2 \ 1 \ 1]$ (D)	Dipolaire effectif 0.036	Symétrique 0.07	Symétrique 0.07
$\langle 1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 2 \ 1]$ (D)		Dipolaire effectif 0.036	Symétrique 0.07
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ $[1 \ 1 \ 2]$ (D)			Dipolaire effectif 0.036
$J_0 = 0.25 \cdot 10^{12} \text{ m}^{-2}$	$J(pp) = 5 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$	$N_{act} = 3$	$\gamma_0 = 0.4 \cdot 10^{-9}$

Tableau IV.28: Valeurs d'interaction des systèmes de glissement principaux

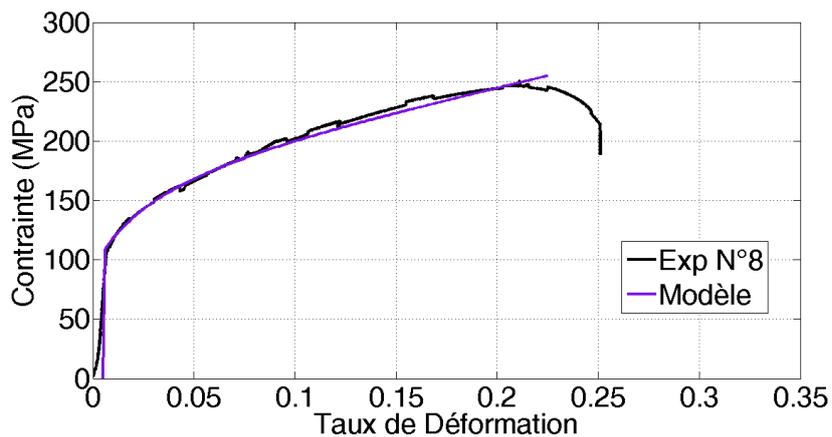


Figure IV.79 : Simulation de la courbe contrainte-déformation

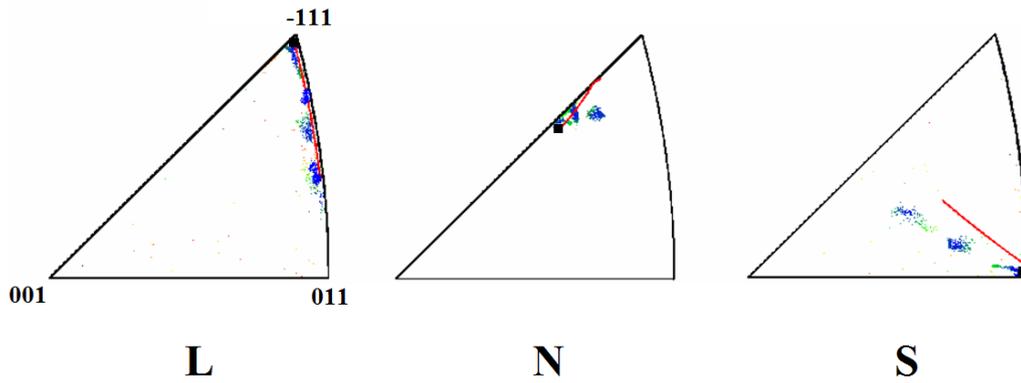


Figure IV.80 : Simulation de la rotation cristalline

Pour cet axe de traction initialement symétrique, 3 systèmes de glissement de plan (112)D sont presque equi sollicités. On a observé que les 3 systèmes sont actifs dans des zones différentes du cristal avec un système dominant et qui prend le pas sur les autres puisque l'axe est instable. Il est intéressant de constater que la simulation faite en hypothèse de glissement simple mais en utilisant $n=3$ pour décrire la triple densité initiale de dislocations (donc le libre parcours réduit qu'elle engendre) restitue correctement la rotation et l'écroutissage avec les mêmes coefficients d'interaction relatifs aux plans (112)D que dans les 2 simulations précédentes et notamment le coefficient dipolaire effectif pour les systèmes de plan (112)D.

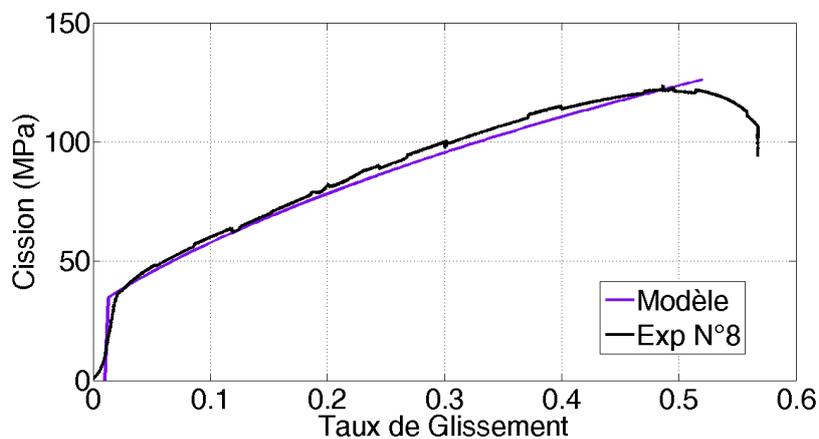


Figure IV.81 : Simulation de la courbe cission-glisement

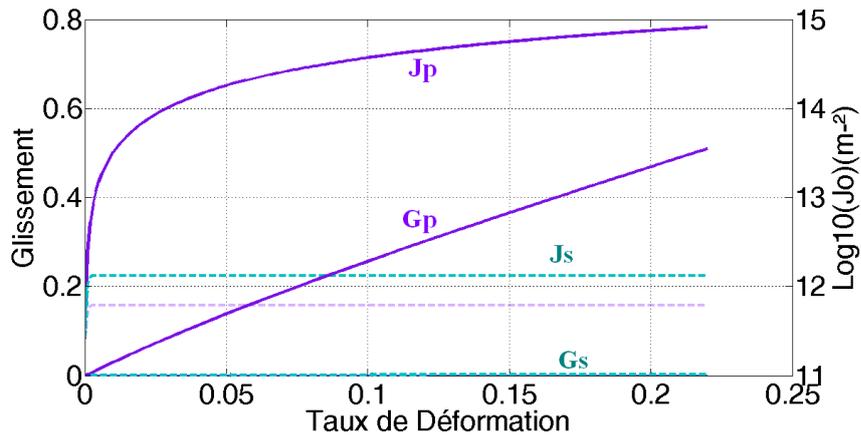


Figure IV.82 : Simulation des glissements et densités de dislocation des systèmes principaux

Essai de compression (112)D - 1 :

	$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 -1 2]	$\langle 1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 1 -2]	$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [1 1 2]	$\langle 1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 1 2]
$\langle -1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 -1 2] (D)	Dipolaire effectif 0.036	Symétrique 0.07	Symétrique 0.07	Symétrique 0.07
$\langle 1 \ 1 \ 1 \rangle$ [1 1 -2] (D)		Dipolaire effectif 0.036	Symétrique 0.07	Symétrique 0.07
$\langle -1 \ -1 \ 1 \rangle$ [1 1 2] (D)			Dipolaire effectif 0.036	Symétrique 0.07
$\langle 1 \ -1 \ 1 \rangle$ [-1 1 2] (D)				Dipolaire effectif 0.036
$J_0=0.2^E 12 \ m^{-2}$	$J(pp)=5^E 14 \ m^{-2}$	Nact=2	$Y_0=2^E -9$	

Tableau IV.29: Valeurs d'interaction des systèmes de glissement principaux

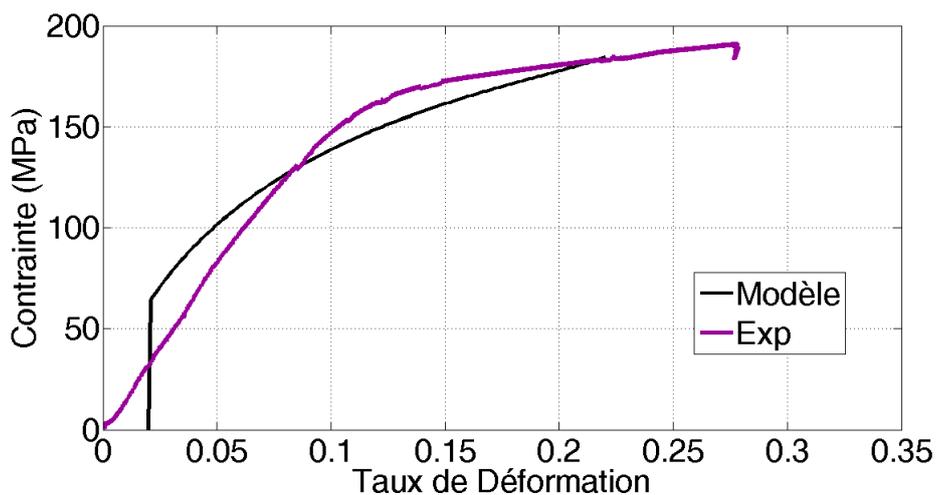


Figure IV.83 : Simulation de la courbe contrainte-déformation

On est dans la situation compliquée d'avoir 4 systèmes de plan (112)D quasiment equi-sollicités et 8 systèmes de plan (110) également susceptibles d'être activés. L'observation MEB nous dit qu'on a

très rapidement sinon d'emblée un glissement double ou triple, mais il n'est pas nécessairement équilibré car la rotation se fait initialement vers la normale à un plan de type (112)D, signe de glissement simple dominant. Le taux d'érouissage est élevé, conformément aux situations de sollicitation symétrique déjà rencontrées pour lesquelles le libre parcours moyen est fortement réduit par la multiplicité des systèmes de forte cission résolue initiale. La simulation effectuée avec $n=2$ et du glissement simple initial donne une rotation correcte, ainsi qu'une courbe contrainte-déformation pas trop éloignée de la courbe expérimentale, début excepté. La simulation indique l'activation d'un système secondaire pour une déformation de l'ordre de 15% qu'on peut estimer tardive par rapport à l'observation mais raisonnable néanmoins.

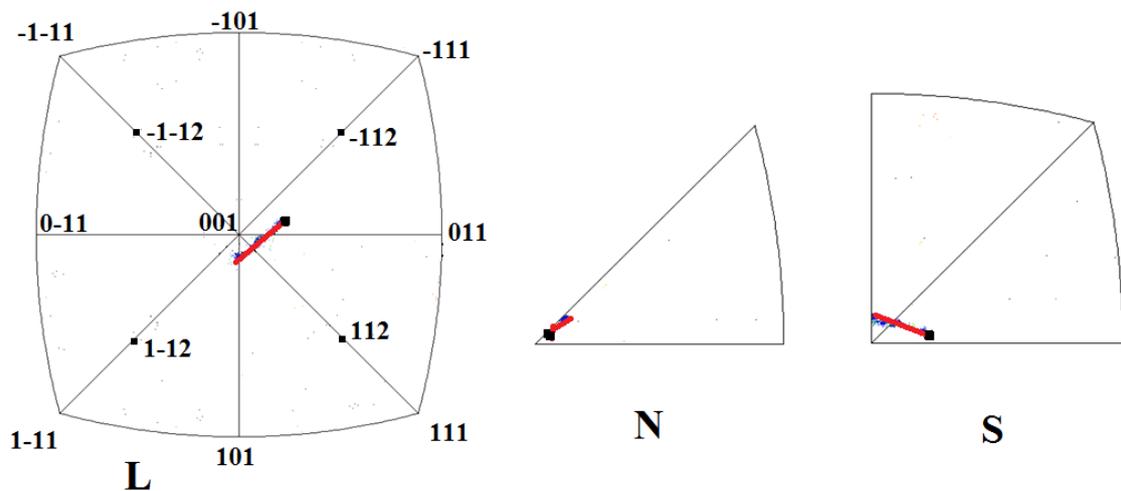


Figure IV.84 : Simulation de la rotation cristalline

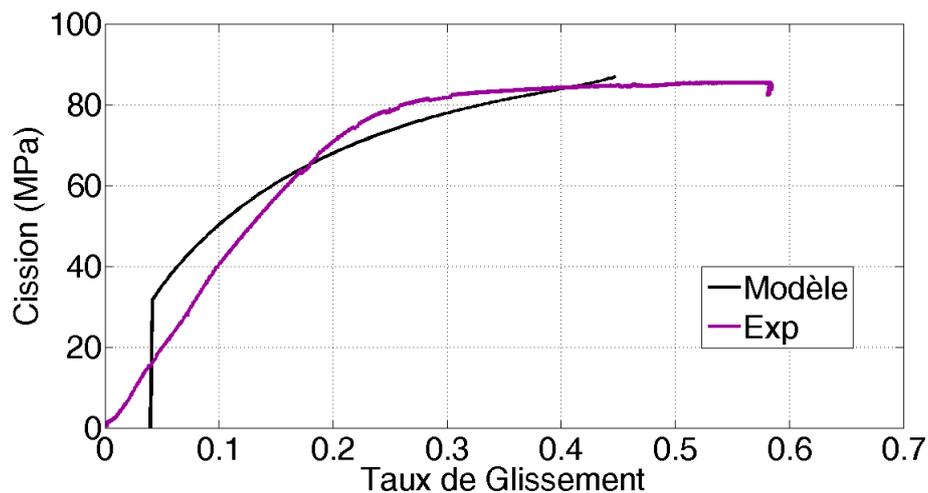


Figure IV.85 : Simulation de la courbe cission-glissement

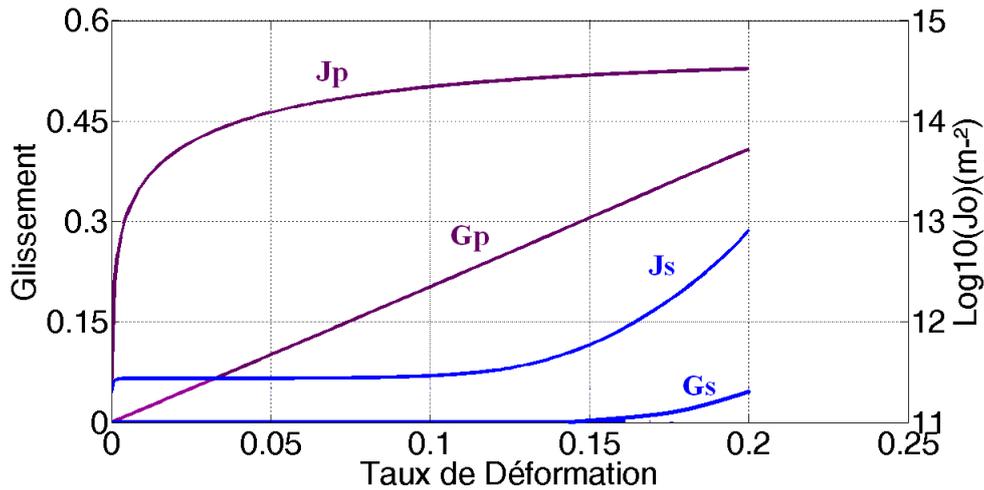


Figure IV.86 : Simulation des glissements et densités de dislocation des systèmes principaux

Au total, cette troisième série de simulations, pour des situations de glissement sur plans (112)D, a été réalisée en n'introduisant en plus des coefficients déjà introduits pour le glissement (110) et le glissement (112)F qu'un coefficient d'interaction dipolaire effectif pour les systèmes de plan (112)D, de valeur 0.036, plus fort que celle du coefficient des systèmes de plans (110), égale à 0.03. L'essai de compression est plutôt bien reproduit compte tenu de la complexité des situations proches de l'axe de haute symétrie qu'est la direction $\langle 001 \rangle$.

IV.5. Discussion des résultats.

De l'ensemble des 3 séries de simulation réalisées, il ressort qu'une reproduction plutôt satisfaisante des essais in situ de comportement plastique effectués est obtenue dans le cadre de modélisation nouveau de la dynamique des dislocations, sans nécessité de démultiplier les coefficients d'interaction de la matrice d'interaction pourtant élargie aux systèmes de plans (112), au contraire même puisque un seul coefficient a été utilisé pour l'ensemble des différents types possibles d'interaction de jonction, et seulement en extrapolant certains des résultats établis pour la structure « simple » CFC aux caractéristiques spécifiques de la structure CC.

La modélisation effectuée a scrupuleusement suivi les enseignements récents de la DD concernant la plasticité cristalline. En particulier,

- les coefficients d'interaction déjà calculés pour les systèmes de plans (110) pour une densité de dislocation de référence ont été utilisés en les corrigeant de l'effet tension de ligne à partir d'une mesure de la densité réelle initiale de dislocations dans les monocristaux utilisés, et en les simplifiant pour n'en retenir que 3, pour les interactions dipolaires, les interactions colinéaires et l'ensemble des interactions de jonctions ;

- il a été tenu compte des effets de la présence de carbures qui constituent des points de stockage supplémentaire de dislocations, en estimant leur densité et leur taille moyenne à partir des informations disponibles ;
- la contrainte de Peierls, le plus souvent négligée pour le fer alpha à température ambiante a été prise en compte à un niveau réaliste ;
- enfin et l'un des principaux apports de ce travail, les contributions des effets de glissement dévié aux coefficients d'interaction dipolaires effectifs ont été déterminés de la confrontation à l'expérience en extrapolant le formalisme scalaire établi pour les cristaux CFC qui n'ont qu'une contribution de déviation par système de glissement, à la forme matricielle requise pour les cristaux CC dont chaque système de glissement compte plusieurs systèmes déviés, même en se restreignant aux seuls plans de type (110).

Sur ces bases, nous rapportons ci après quelques observations semi quantitatives issues à la fois des essais in situ réalisés et de leurs simulations.

IV. 5.a. Limites d'élasticité et systèmes actifs

Globalement, les essais de traction et de compression sont répartis dans l'ensemble du triangle de référence tel que le montre la **figure IV.1**, reproduite en **figure IV.87**.

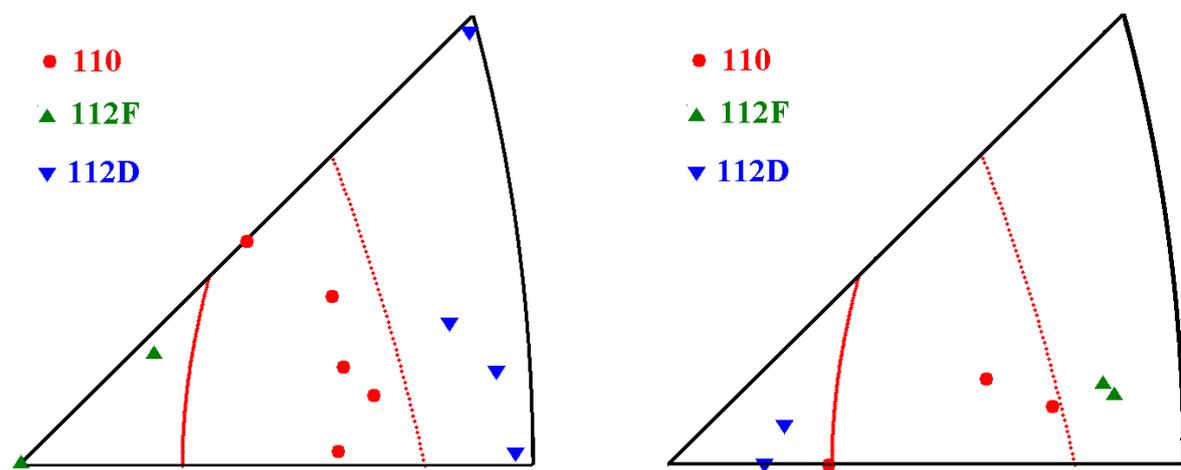


Figure IV.87 : Toutes les orientations des monocristaux de fer alpha :
Gauche – traction et Droite - compression

Il n'y a pas pour chaque orientation à la fois l'essai de traction et l'essai de compression, car il était en général inaccessible de disposer des 2 géométries d'éprouvette pour la même orientation. On a vu que les essais de compression étaient plus entachés d'effets expérimentaux parasites (frottement,

alignement imparfait, géométrie imparfaite) que les essais de traction et qu'une grande variabilité intrinsèque aux mécanismes de plasticité rendait la détermination de cissions critiques par systèmes assez illusoire.

Pour les essais de traction, les valeurs de cissions critiques obtenues et rapportées sur la **figure IV.88** montrent pour nos essais des valeurs plutôt plus faibles autour de l'axe $\langle 001 \rangle$ et plutôt plus fortes au voisinage de l'axe $\langle 011 \rangle$ et dans une partie de la zone $\langle 011 \rangle \langle 111 \rangle$ du côté de $\langle 011 \rangle$.

Ceci indique que globalement la cission critique des systèmes de plan (112) en sens facile est plus faible qu'en sens difficile, ce qui par définition semble aller de soi.

Dans toute la zone intermédiaire où les plans (110) sont concernés les valeurs fluctuent entre le mini et le maxi relatifs respectivement aux plans (112)F et (112)D sans qu'il soit possible d'associer précisément ces fluctuations aux effets pointés au chapitre III, c'est-à-dire d'une part la subdivision du triangle de référence en (7) sous domaines où les jeux de coefficients d'interactions définissant les cissions critiques peuvent être différents et d'autre part les variations plus continues dues aux effets de glissements déviés sur les multiples plans de zone d'une direction donnée.

Ce second point lève notamment une apparente contradiction entre la remarque faite au chapitre I que l'écart maximum de cissions critiques entre (112) sens facile et sens difficile ne peut dépasser $\left(2/\sqrt{3}\right)^2 = 4/3$ pour que les 2 sens soient observables de part et d'autre d'un domaine de glissement (110) alors que dans le triangle de la **figure IV.88** le rapport maxi/mini de 40/27,5 atteint 45% : si la cission critique n'est pas constante dans tout le domaine d'activité du glissement de plan (110), la comparaison des cissions sur (110) et (112)F d'un côté et sur (110) et (112)D de l'autre côté n'implique pas nécessairement la même cission critique pour (110).

Ceci est un résultat important et inédit ou du moins non relevé.

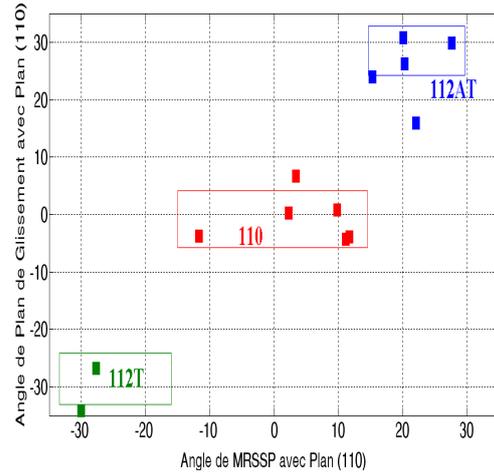
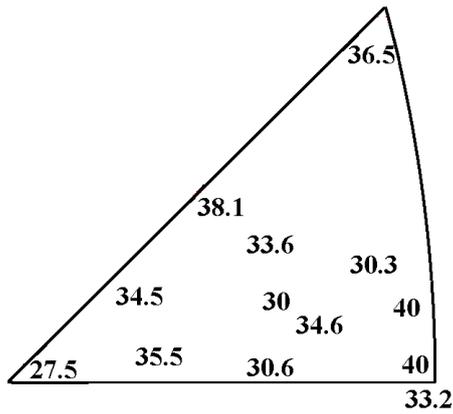


Figure IV.88 : Les cissions critiques des essais de traction (gauche) et les orientations des traces de glissement principal associées (droite)

IV.5.b. Les caractéristiques d'écroutissage en glissement simple et glissement multiple.

L'analyse de l'évolution de l'écroutissage à partir des courbes expérimentales très bruitées s'est avérée difficile. Une alternative a été d'utiliser les courbes simulées les plus correctes pour examiner les taux d'écroutissage qu'elles spécifient.

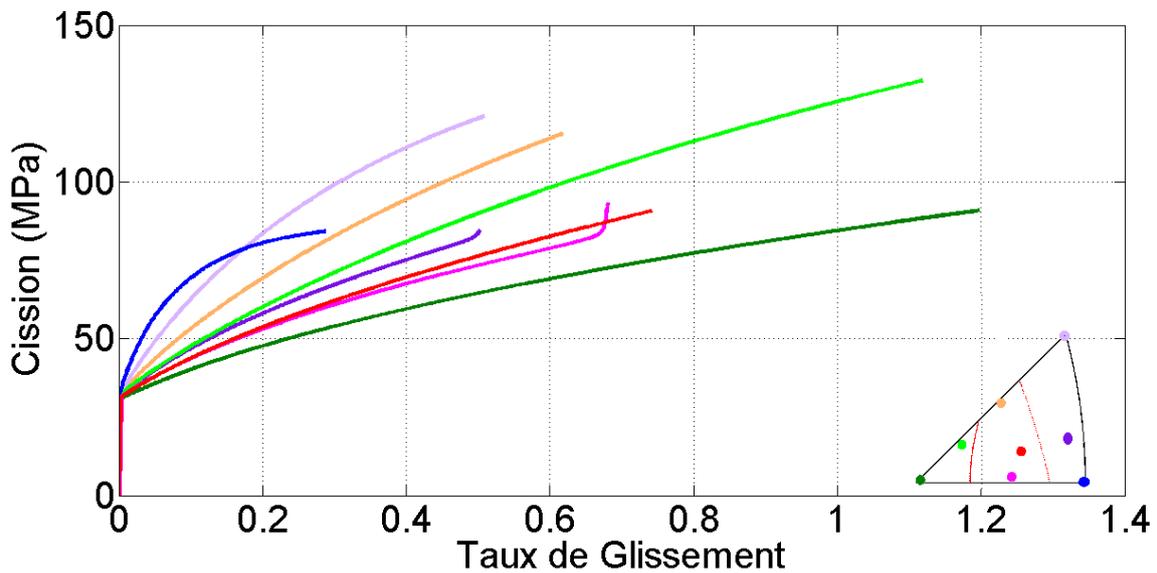


Figure IV.89 : Les courbes cission glissement de l'ensemble des simulations effectuées avec le même densité de dislocation initiale

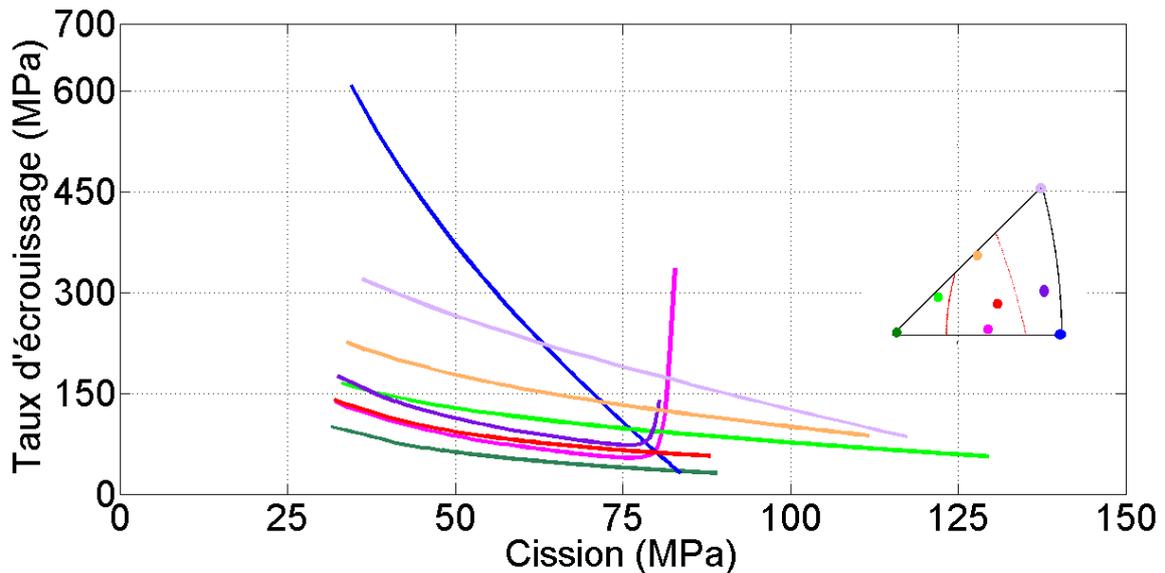


Figure IV.90 : Les évolutions des taux d'écroutissage avec la cission critique (ou résolue) sur le système actif à partir des courbes simulées de contrainte-déformation.

La comparaison des taux d'écroutissage ne permet pas de dégager d'éléments quantitatifs supplémentaires, mais ce n'est pas très surprenant dans la mesure où la loi d'écroutissage issue de la DD porte diverses complexités dont les effets superposés conduisent à ces résultats. L'analyse expérimentale directe s'avère on le comprend bien difficile.

IV.5.c. Les rotations de réseau et les interactions entre système primaire et secondaire.

Le **figure IV.91** rassemble les rotations de réseau observées durant ces essais de traction qui pour la plupart commencent par du glissement simple, du moins monodirectionnel puisque certaines sinuosités des traces n'excluent pas complètement du glissement colinéaire. On notera que les résultats de DD qui attribuent un coefficient d'interaction élevé entre systèmes colinéaires plaident en faveur de peu de glissement colinéaire même si 2 sont équivalents. Mais le glissement localement dévié n'est pas le glissement colinéaire et ce dernier peut expliquer les sinuosités.

Les différents overshoot observés (les orientations 3 et 8 n'en montrant pas) indiquent que celui-ci est plus important lorsqu'on active un système de plan (112)F que lorsqu'on active un plan (110) et davantage encore lorsque l'on active un système de plan (112)D.

Pour traduire cette observation plus précisément, on constate que pour 2 directions de glissement à 71° l'une de l'autre, il est plus difficile d'activer un système secondaire non colinéaire au premier de plan (110) lorsque un plan (112)F a d'abord été actif que lorsque le plan primaire est de type (110). Et lorsque le plan primaire est de type (112)D, l'activation en second un plan (112)D non colinéaire ou d'un plan (110) non colinéaire semble plus facile, le glissement double homogène de 2 systèmes

non colinéaires se réalisant le plus facilement pour 2 plans (112)D au voisinage d'un axe $\langle 011 \rangle$ alors que pour 2 plans (110) en milieu de zone $\langle 001 \rangle$ - $\langle 001 \rangle$ et pour 2 plans (112)F du côté $\langle 001 \rangle$ de cette zone, cela ne s'observe que si l'on se trouve très rigoureusement sur la zone de symétrie. On notera qu'hormis les orientations 3 et 8, la plupart sont situées proches de la zone de facteur de Schmid égal à 0,5 sur le plan de cisaillement maximum.

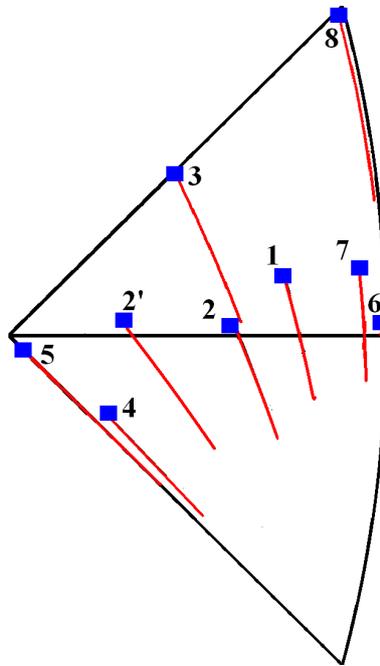


Figure IV.91 : Les overshoot relatifs observés pour les diverses orientations de traction

On peut noter aussi que la direction de glissement du système secondaire concerné dans tous ces essais est toujours à 71° de la direction de glissement primaire vers laquelle se dirigent les rotations illustrées en rouge sur la **figure IV.91**. Cette direction secondaire correspond à l'orientation de l'éprouvette n°8.

Parmi les essais de compression dont la rotation accompagnant la déformation indique la normale au plan de glissement actif, quelques uns apportent des informations relativement à l'overshoot ou à son absence, c'est-à-dire relativement à l'interaction avec le système voisin.

L'information la plus significative concerne l'absence d'overshoot pour la compression activant un plan (110) lorsque la zone de symétrie $\langle 001 \rangle$ - $\langle 111 \rangle$ est atteinte (**figures IV.15** et **IV.16**). Le glissement des 2 systèmes non colinéaires de plans (110) dont les directions de glissement sont à 109° n'est pas empêché par le glissement primaire.

En se rapprochant de la direction $\langle 001 \rangle$ plusieurs triangles de référence sont traversés successivement, comme il a été observé **figure IV.37** : une fois sorti du triangle initial, le premier triangle atteint par l'axe de compression ne semble pas modifier la rotation et ce second système potentiel n'est pas si visible de par les traces de glissement observées (2 traces sont confondues). On

peut noter que ces 2 systèmes sont non colinéaires et de directions de glissement à 71° . La poursuite de la rotation amène à la possible activation d'un 3ème système non colinéaire aux 2 précédents, de plan (112)D toujours, dont cette fois la direction de glissement est à 109° de la direction primaire. L'infléchissement de rotation n'est pas significatif mais ce glissement est, lui, nettement observé sur les micrographies, comme si ce troisième système était plus facile à activer que le second.

Enfin, du côté du glissement (112) en sens facile, la rotation de glissement simple en compression rapproche dans un premier temps l'axe de compression de la direction zone $\langle 001 \rangle$ - $\langle 111 \rangle$ vers la direction $\langle 111 \rangle$. Cette rotation est constatée sur les **figures IV.24** et **IV.25** et la simulation de la **figure IV.68** le reproduit. Un autre essai mené à plus grande déformation mais non analysé car plus imparfait montre, sur la **figure IV.92** un infléchissement de la rotation avant que la zone $\langle 001 \rangle$ - $\langle 111 \rangle$ soit atteinte. Il faut noter que les directions des 3 systèmes de plan (112) equi sollicités lors d'une sollicitation d'axe $\langle 111 \rangle$ sont à 109° les unes des autres. Si ce comportement se reproduisait, il pourrait indiquer une activation très facile du glissement sur le système non colinéaire voisin, dont la direction de glissement est à 109° de la direction primaire.

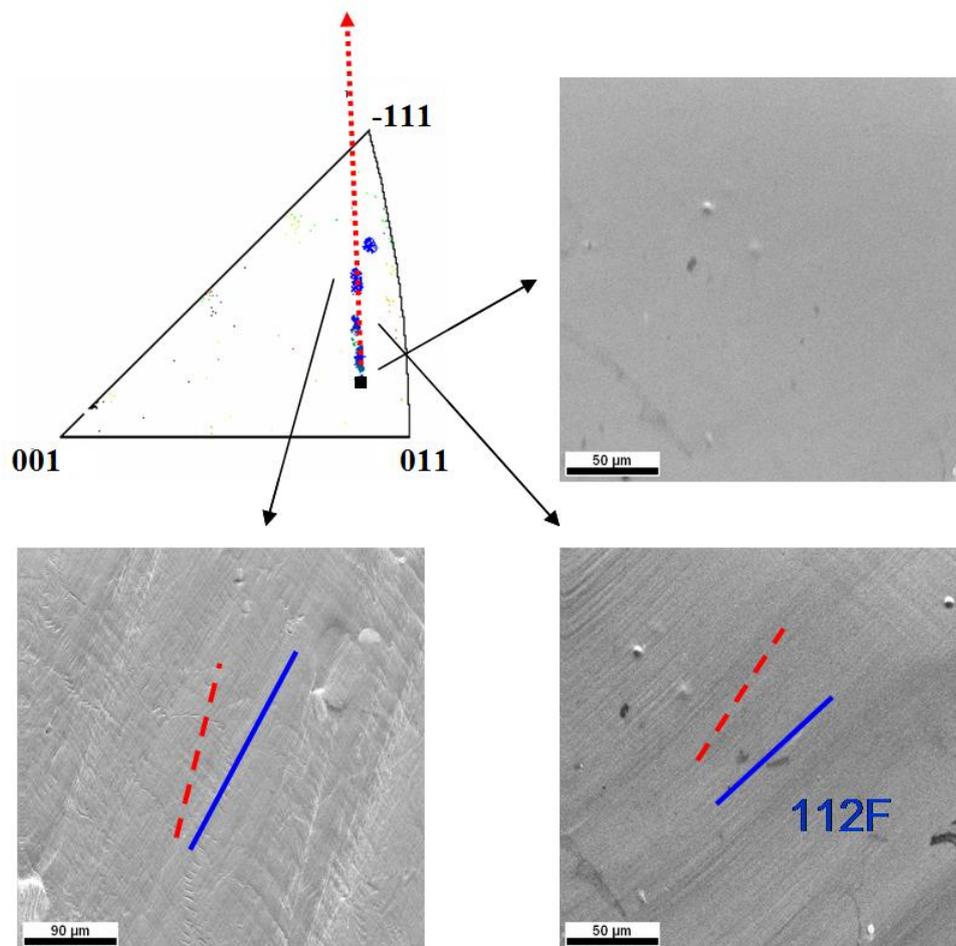


Figure IV.92 : Essai de compression avec activation de glissement de plan (112)F avec infléchissement de rotation avant la zone $\langle 001 \rangle$ - $\langle 111 \rangle$.

Ces quelques résultats associés aux remarques déjà faites conduisent à oser l'hypothèse d'une possible distinction en termes d'anisotropie d'écroutissage selon que seraient simultanément sollicités des systèmes non colinéaires avec des directions de glissement soit en angle aigu, soit en angle obtus, avec un effet moindre des plans d'appartenance des glissements qui interagissent. S'il se confirmait, ce serait un résultat important et utile pour en tirer des simplifications pertinentes de la matrice globale d'interaction. A ce stade, la remarque reste spéculative.

Références du chapitre IV

- [AKI 1977]: Akinori Matsuda (1977). The plastic deformation of Iron single crystals with shear tests in $\{110\}\langle 111\rangle$ and $\{112\}\langle 111\rangle$ slip systems. Transactions of the Japan Inst. Metals, Vol. 18 No. 3 (1977), pp. 214-220
- [DEV 2008]: Devincere B, Hoc T, Kubin L. Science 2008;320:1745.
- [ESS 1979]: Essmann U, Mughrabi H. Philos Mag A 1979 ;40 :731
- [GAM 1991]: Gambin W., 1991. Plasticity of crystals with interacting slip systems Eng. Trans. 39 (3/4), 303-324.
- [GAM 1997]: W.Gambin , F.Barlat. 1997. Modeling of deformation texture development based on rate independent crystal plasticity. International Journal of Plasticity, Vol.13, No. ½, pp.75-85, 1997.
- [GOM 2006]: Go´mez-Garci´a D, Devincere B, Kubin LP. Phys Rev Lett 2006;96(12):125503.
- [ITA 2012] : M. Itakura, H. Kaburaki, M. Yamaguchi. (2012). First-principles study on the mobility of screw dislocations in bcc iron. Acta Materialia 60 (2012) 3698–3710.
- [JAO 1961] : B. Jaoul et D.Gonzalez (1961). *Déformation plastique de monocristaux de fer*. J.Mech, Phys.Solids, 1961, Vol. 9, pp. 16 to 38.
- [JUL 2006] : Julien Chaussidon, Marc Fivel, David Rodney. (2006) The glide of screw dislocations in bcc Fe: Atomistic static and dynamic simulations. Acta Materialia 54 (2006) 3407–3416.
- [HOC 2004]: T. Hoc, B. Devincere, L. P. Kubin. (2004). Deformation stage I of fcc crystals: constitutive modeling. In Procs of 25th Riso International Symposium on Materials Science: Evolution of Deformation Microstructures in 3D, Risoe, 6-10 September, pages 43-60.
- [KUB 2008]: L. Kubin, B. Devincere, T. Hoc, 2008. Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals, Acta. Mater., elsevier, 6040-6049, 2008.
- [QUE 2008]: Sylvain QUEYREAU, 2008. Thèse: Etude des mecanismes d'écrouissage sous irradiation de la ferrite par simulations de dynamique de dislocations. Université Pierre et Marie Curie.
- [QUE 2009]: Sylvain Qiereau, Ghiath Monnet, Benoît Devincere, (2009). Slip systems interactions in alpha-iron determined by dislocation dynamics simulations. International Journal of Plasticity 25 (2009) 361-377.
- [SPI 1970]: W. A. Spitzig and A. S. Keh, (1970). The effect of orientation and temperature on the plastic flow properties of iron single crystals. Acta Metallurgica, Vol. 18, June 1970.
- [TAK 1967]: S. Takeuchi, E. Furubayashi, T. Taoka, (1967). Orientation dependence of yield stress in 4.4% silicon iron single crystals. Acta Metallurgica, Vol. 15, July 1967.

CHAPITRE V –ESSAIS IN SITU EN MICROSCOPIE A FORCE ATOMIQUE

A partir de plusieurs séries d'images (entre 20 et 40 clichés consécutifs selon les cas) prises lors d'essais in situ de traction, des reconstitutions de la cinématique de la déformation plastique sur monocristaux ont été effectuées, permettant de visualiser l'hétérogénéité du glissement d'une part et sa planéité d'autre part. Une analyse fine de l'émergence du glissement en surface a été menée par Charlie Kahloun sur une série d'images obtenues pour un glissement de type (110) en traction.

Un article a été publié qui constitue la partie principale de ce chapitre. Nous présentons d'abord quelques séquences d'images en 2D et en 3D qui permettent une appréciation de la planéité de glissement comparée avec d'une part les images similaires rapportées au **Chapitre II** pour le cuivre et la planéité comparée pour le glissement sur plans (110) et sur plans (112) dans le fer.

Glissement (110) en traction in situ AFM

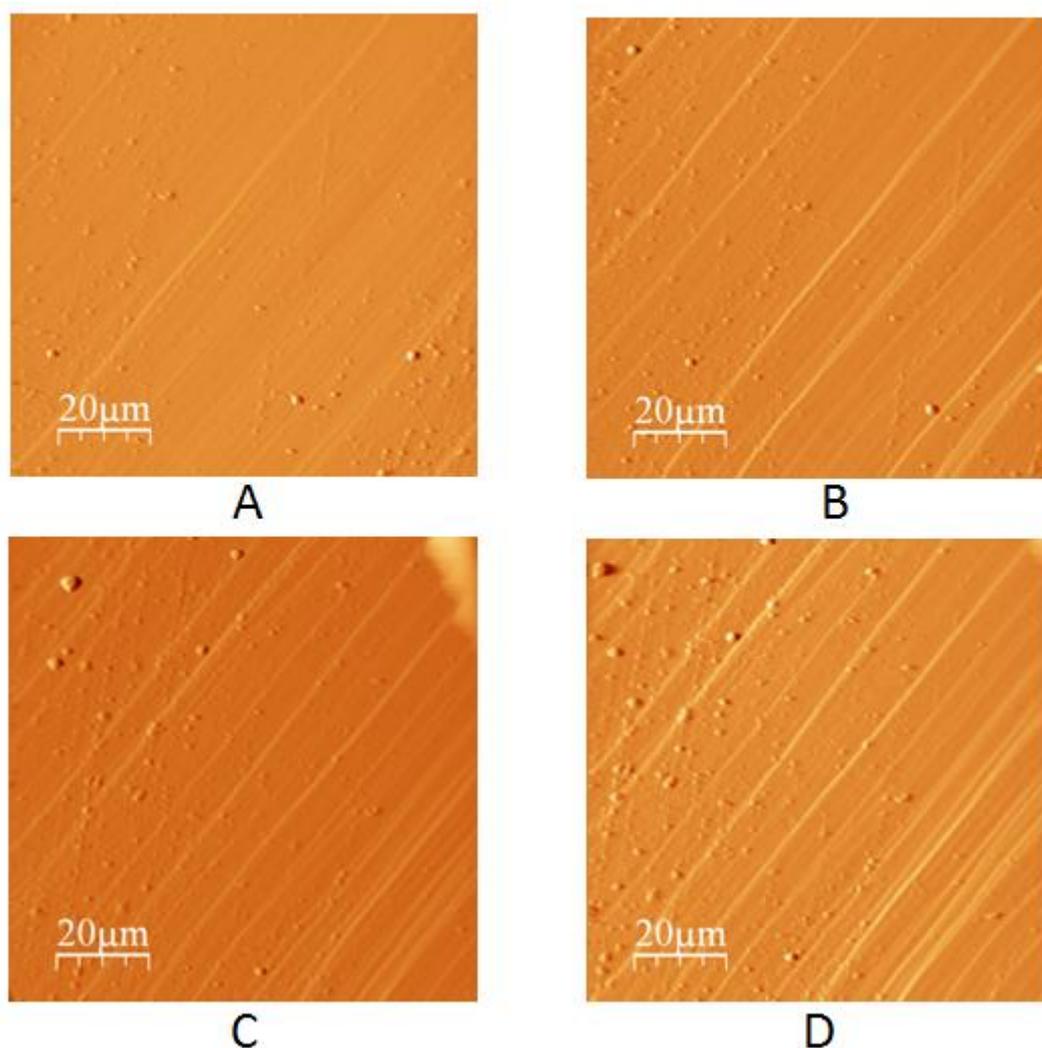
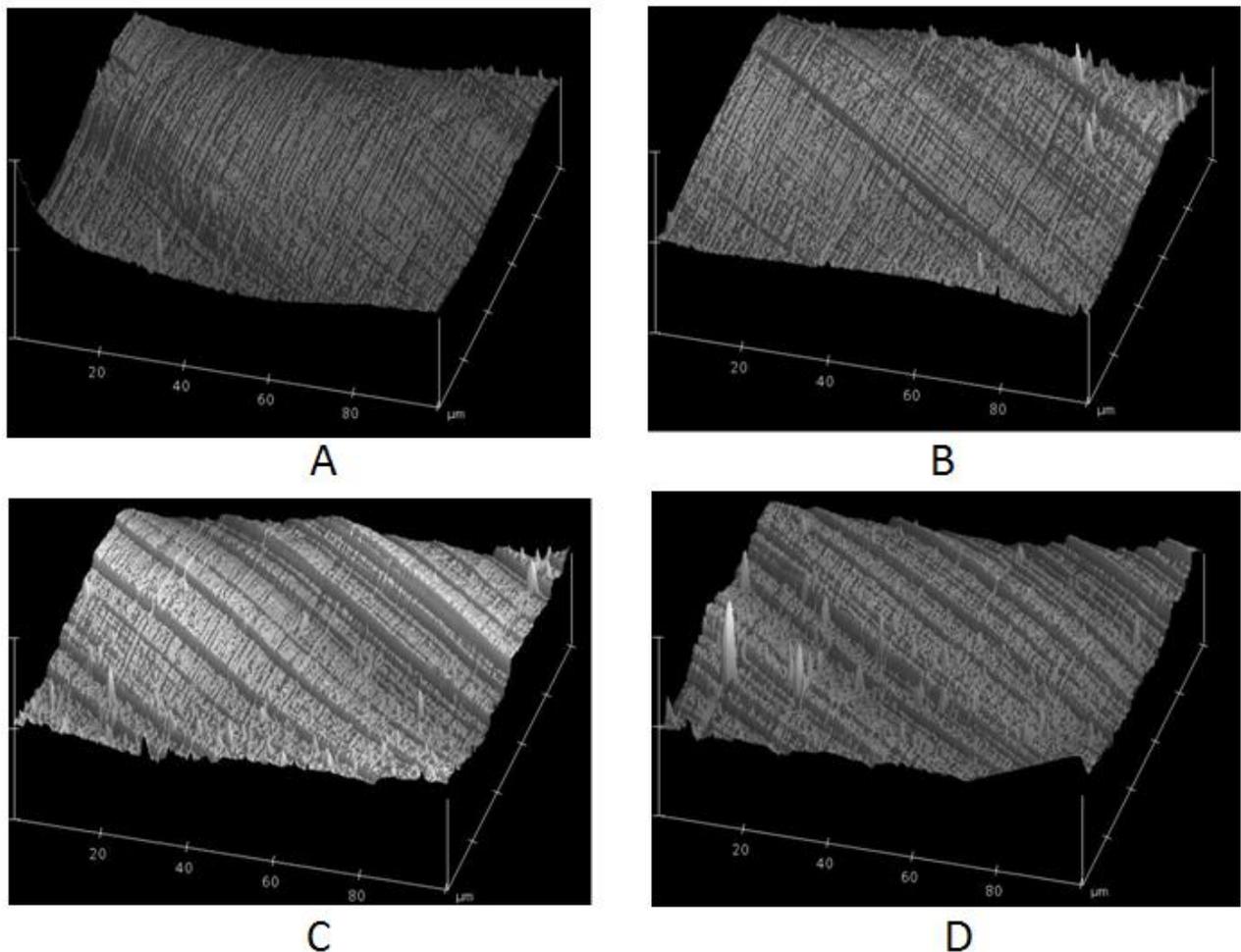


Figure V.01 : Glissement (110) dans Fe-alpha de 1% de déformation (image A) jusqu'à 10% (image D).

Le résultat AFM nous montre que le glissement sur plan (110) est un glissement d'aspect aussi planaire que le glissement dans la structure C.F.C., c'est-à-dire que sur les images 2D de la **figure V.01** les traces sont rectilignes hormis quelques écarts pouvant tout aussi bien provenir du relief (état de surface) que de fronts non rectilignes pour les plans émergeant que de contributions de glissement dévié. Or on a vu que dans la structure CC, la multiplicité des possibilités de glissement dévié rend sa totale absence improbable.

Une autre différence constatée avec le cas du cuivre est une émergence plus brutale en surface que pour ce dernier. Ceci peut provenir de qualités inégales de l'état de surface.

La distance moyenne entre les lignes de glissement est d'une dizaine de micromètres, et entre les grosses lignes on a des lignes de glissement plus fines.



*Figure V.02 : Glissement (110), images AFM en 3D, dans une séquence proche de la **fig.V.01***

Les images 3D de la **figure V.02** distinguent parfaitement la part de non planéité qui provient de fronts de glissement non rectilignes pour les plans émergeant, et la part de non planéité venant de glissement non plan : sur cet exemple, cette seconde part est très faible, les plans observables apparaissent tout à fait plan à l'échelle de la dizaine de micromètres. On constate également que les

profils des fronts non rectilignes des glissements par plan suit de près le profil de la surface, indiquant pour la zone de ces images, une quantité de glissement par plan (un nombre de dislocation émergeant) avec constant le long des fronts.

Si on examine ces profils, on constate également que les plans des bandes de glissement sont parallèles. Les images ont été capturées avec à peu près le même interval de déplacement. L'image n°7 correspond à 2% de la déformation et l'image n°15 correspond à 10% de la déformation.

La position de chaque grande ligne de glissement est quasiment fixée. Par contre, on passe d'une répartition des lignes en surface assez homogène (des petites lignes de glissement partout) à un état de surface plus hétérogène, avec quelques lignes de glissement qui ont évolué davantage.

Une visualisation qualitative de ces hétérogénéités et de leur évolution avec la déformation par une méthode de filtrage médian (voir l'article) est reportée sur la **figure V.03**.

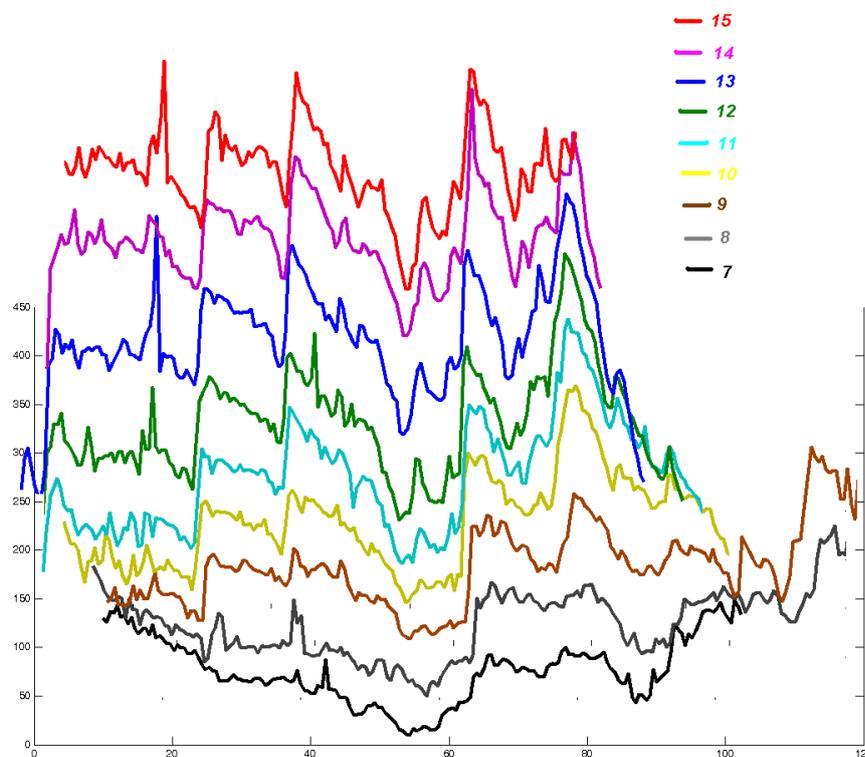


Figure V.03 : Evolution des traces de glissement (110), longueur en μm et hauteur en nm

Glissement (112)D en traction in situ AFM

Un second exemple est reporté sur les **figures V.04 à V.06** qui concerne le glissement sur plan (112). L'axe de traction est proche d'une direction $\langle 110 \rangle$, les systèmes de plan (112) sont donc activés dans le sens difficile. L'évolution des lignes de glissement est le même que le cas du glissement de plans (110). Par contre sur les vues 2D de la **figure V.04** les lignes de glissement sont

plus sinueuses. Il est plus difficile de conclure que le glissement est planaire où non. Si on définit que le glissement planaire est un glissement qui ne change pas de plan de glissement sur une distance de 1000 plans ou sur quelques μm , on conclura à un glissement plutôt de type planaire également. Car bien que les lignes de glissement soient sinueuses, si on le coupe en segments de quelques μm , on a des segments assez droits. Et surtout, si on regarde globalement la forme des lignes de glissement, malgré les perturbations, les lignes restent encore parallèles.

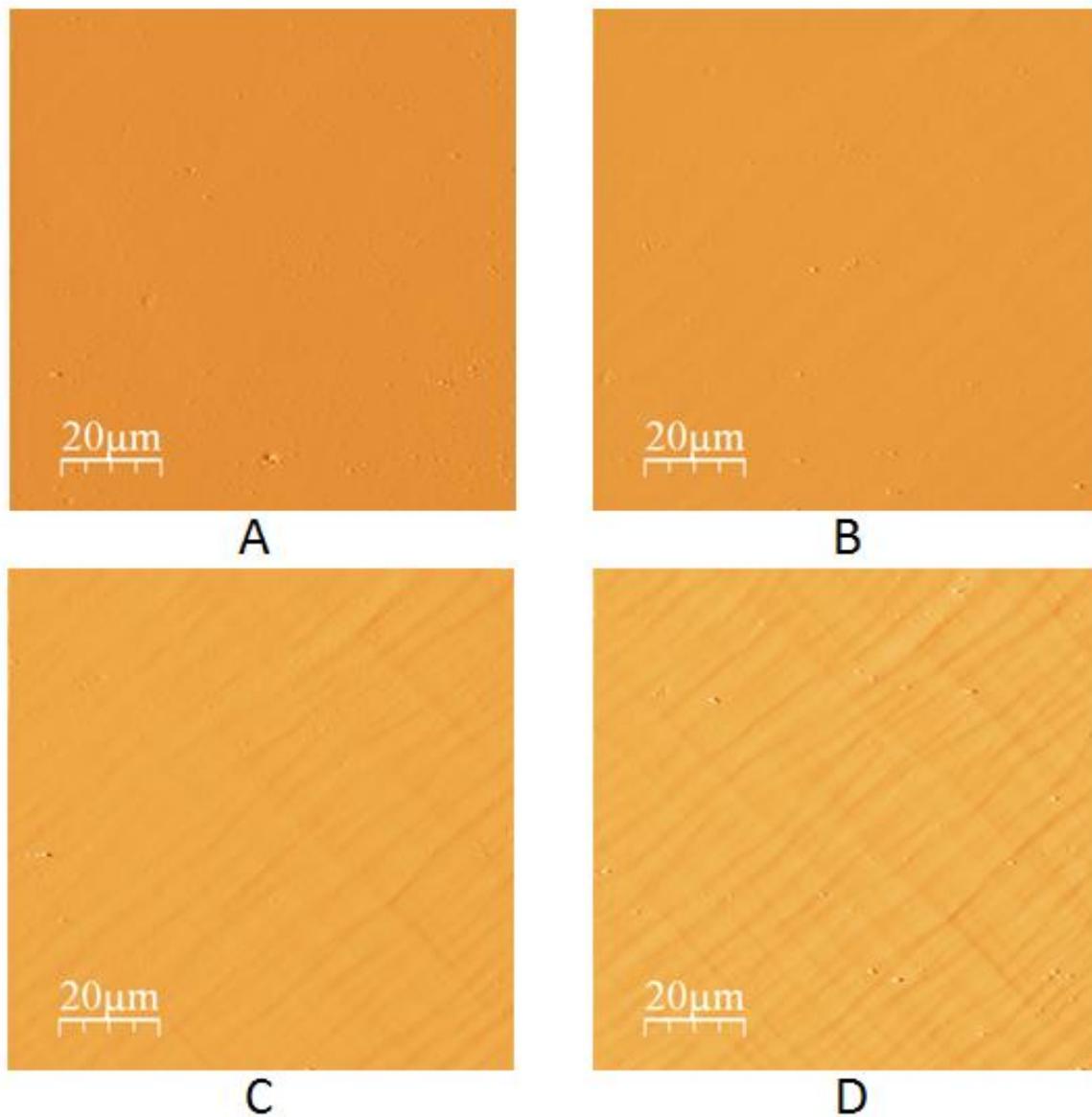


Figure V.04 : Glissement (112)D dans $\text{Fe}\alpha$, de 1% à 10% de déformation environ.

Le fait qu'il y ait 2 plans de glissement actifs ajoutent encore à la difficulté d'analyse car les croisements des deux familles de plans créent des décrochements le long des traces.

Les vues en 3D (**figure V.05**) apportent là aussi des précisions sur cette planéité :

Les images en 3D montrent que les lignes de glissement sont plus droites qu'il n'y paraît en 2D. S'agissant d'une situation de glissement double non colinéaire, les deux systèmes n'apparaissent pas sous le même angle. L'un des systèmes montre des plans de glissement bien nets comme dans l'exemple précédent de plans (110), tandis que l'autre système apparaît davantage comme une ondulation. Or les deux systèmes sont de même type et sans être égales les deux intensités d'activité sont comparables (ce qui correspond à la stabilité constatée de cette direction de traction). Les faces planes de ce second système peuvent être dans la partie du vallonnement que nous ne voyons pas mais nous n'avons pas pu tourner l'image sous un angle plus favorable.

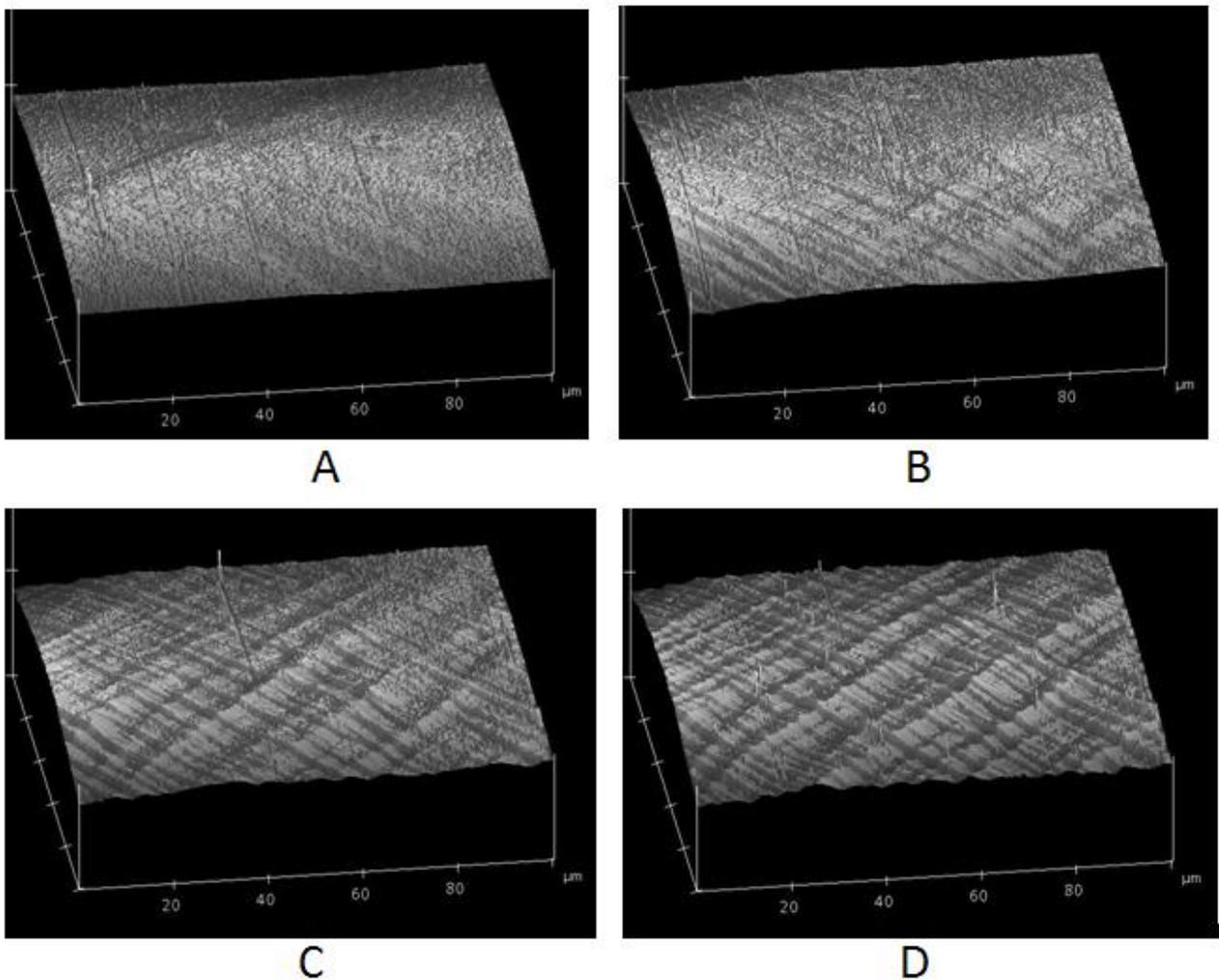


Figure V.05 : Glissement (112)D, images AFM en 3D, dans une séquence proche de la figure V.04

En comparaison au cas de glissement double dans le cuivre ici on ne voit pas vraiment ici les 2 familles de facettes de manière aussi tranchée. Sur ces images, le second système semble avoir plus de difficultés à émerger que le premier. Ceci rejoint la discussion du **chapitre IV** à propos de l'influence sur le libre parcours moyen d'une sollicitation qui est presque égale sur plusieurs

systèmes. Le premier à s'activer semble rendre l'activation des seconds beaucoup plus contrainte même si les sollicitations de tous sont proches.

Pourtant la stabilité de l'axe implique que le second système arrive à équilibrer le premier.

Les profils des lignes de glissement principales sont reportées sur la **figure V.06**. Les images ont été capturées avec le même interval de déplacement. L'image n°20 correspond à 2% de la déformation et l'image n°40 correspond à 10% de déformation.

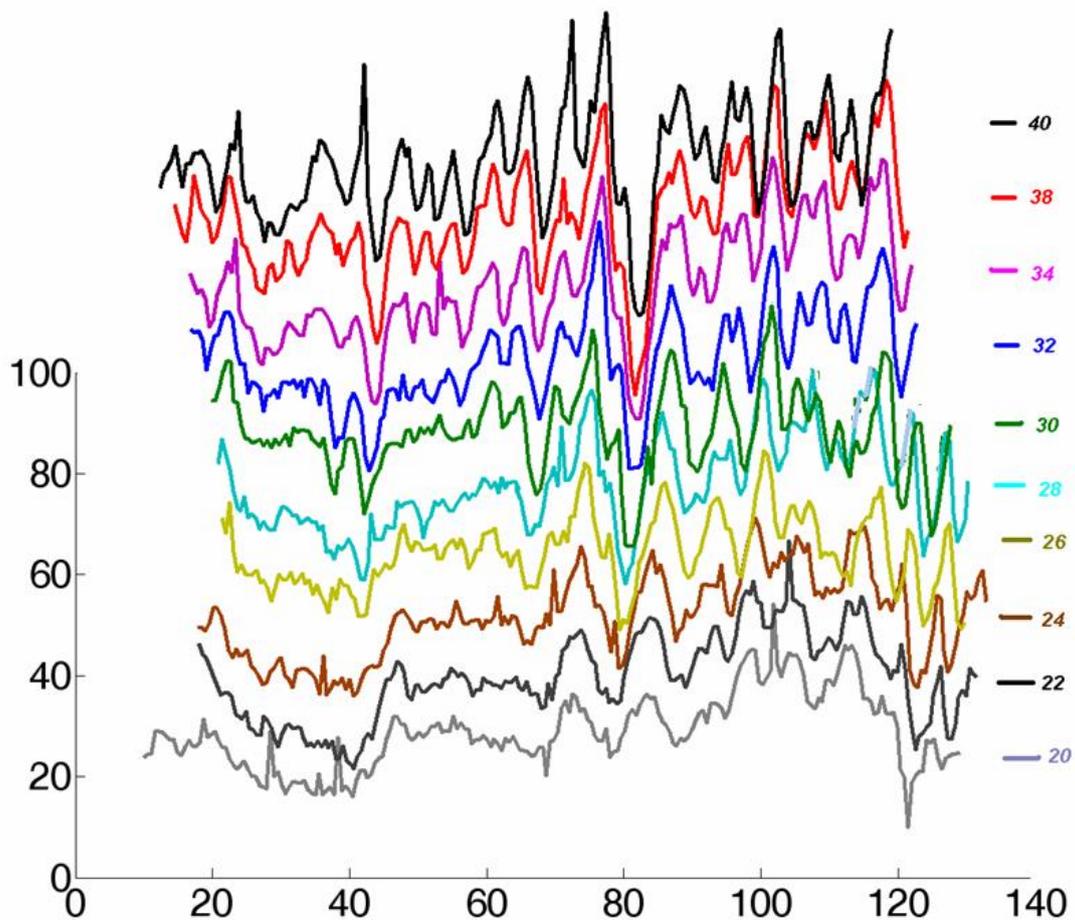


Figure V.06 : Evolution des traces de glissement (112)D, longueur en μm et hauteur en nm

Les profils montrent un glissement plus homogène que dans le cas des plans (110), la hauteur de chaque lignes de glissement étant plus faible que le cas (110) mais leurs nombre est plus grand. La position de chaque grande ligne de glissement ne change pas, mais entre eux on a plein de lignes moyennes.

Glissement (112)F en traction in situ AFM

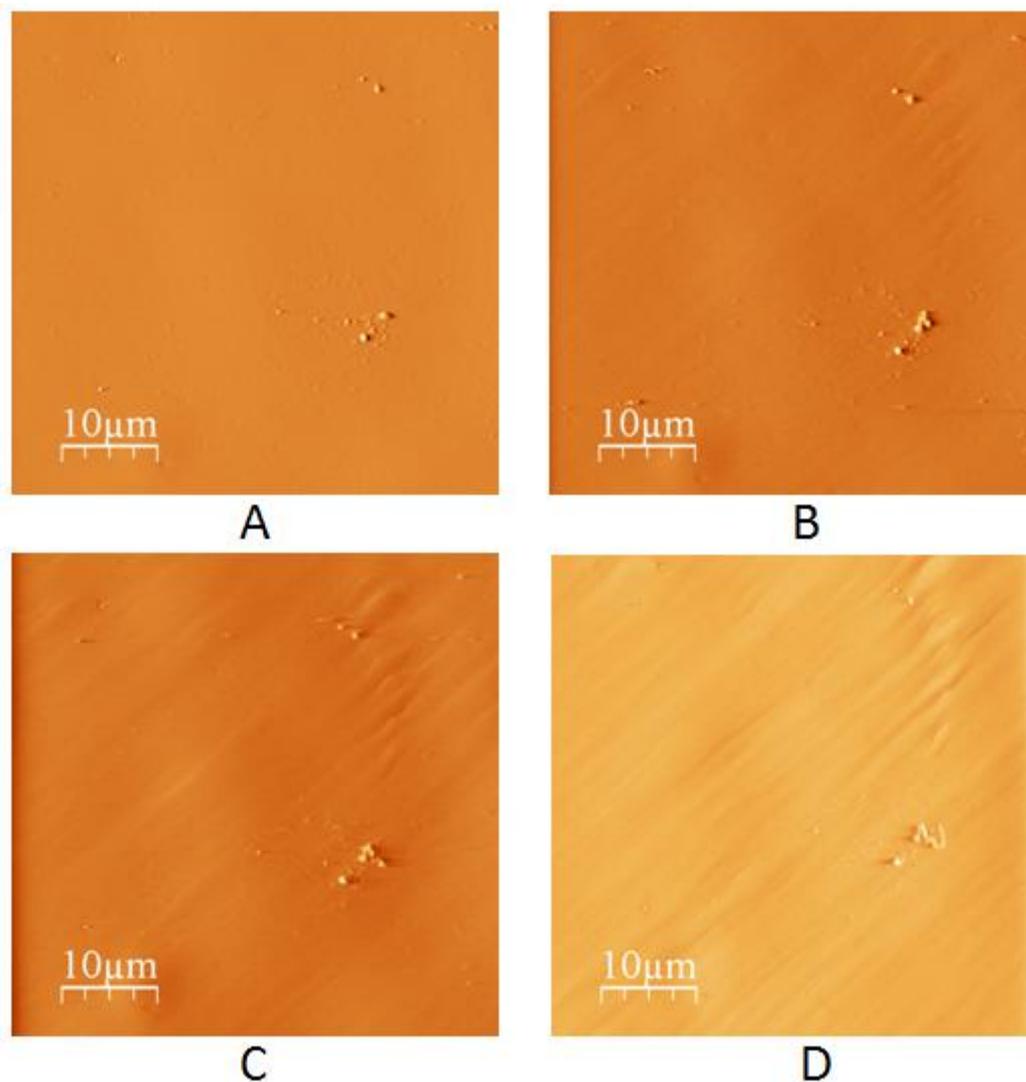


Figure V.07 : Glissement (112)F dans $Fe\alpha$, de 1% à 10% de déformation environ.

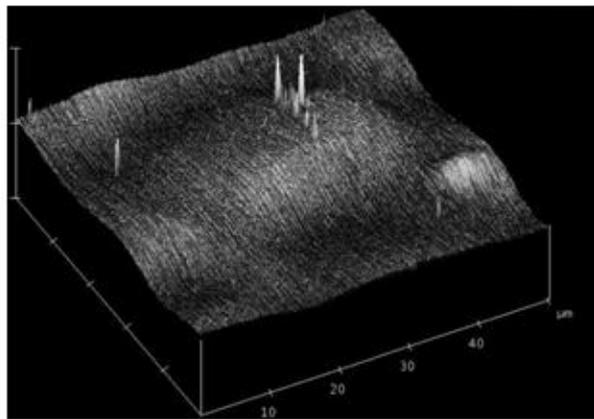
Dans cet essai, l'axe de traction est proche de la direction $\langle 115 \rangle$ donc sur la zone $\langle 001 \rangle$ - $\langle 111 \rangle$ du côté de $\langle 001 \rangle$ dont on a vu qu'elle est favorable à un glissement simple de plan (112)F. L'état de surface est plutôt propre, mais jusqu'à 10% de la déformation on voit très peu de lignes de glissement.

En comparaison au cas de glissement de plan (110) où le glissement était concentré sur quelques bandes de glissement, montrant des lignes de glissement sortant nettement en surface.

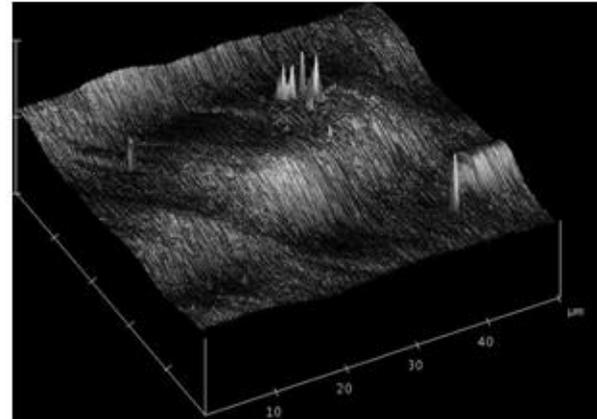
En comparaison au cas de glissement de plan (112)D où les bandes de glissement étaient plus nombreuses que pour le cas de plan (110), (indépendamment du fait qu'il y ait 2 systèmes actifs dans notre cas traité), avec une hauteur de bande de glissement plus faible dans l'ensemble, ce qui rendait déjà plus difficile de voir les lignes de glissement que le cas (110).

Dans le présent exemple on voit davantage de petites lignes de glissement, ce qui correspond à un glissement plus homogène que dans les 2 cas précédents et donc une planéité de glissement encore plus difficile à évaluer.

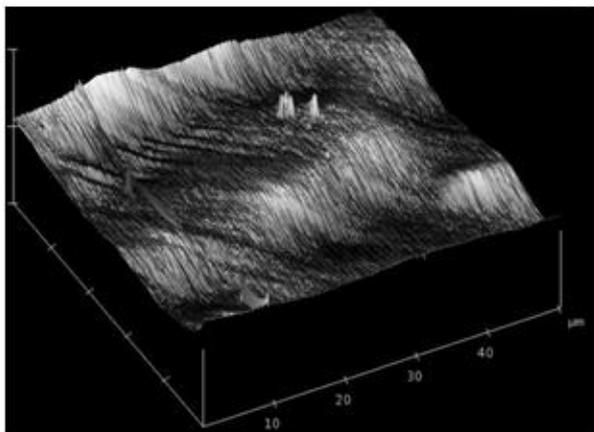
Malgré la difficulté d'observation des lignes de glissement sur les clichés B,C,D qui émergent moins nettement en surface, on constate que les lignes de glissement sont plutôt assez droites, sans notable différence de ce point de vue avec les 2 exemples précédents, ce sur des distances de quelques dizaines de microns du moins.



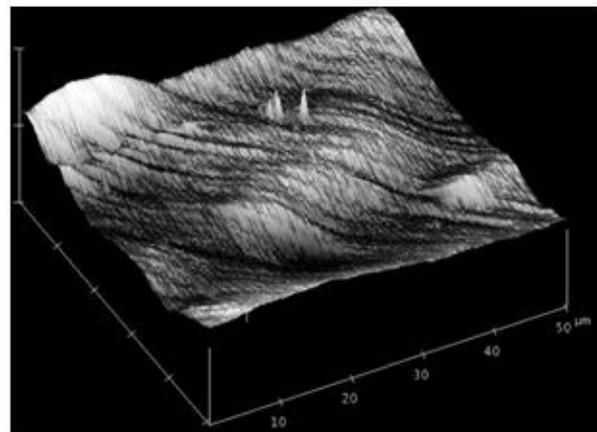
A



B



C



D

Figure V.08 : Glissement (112)F, images AFM en 3D, dans une séquence proche de la figure V.07

Les images 3D montrent mieux, dans ce cas également, les lignes de glissement que le cas 2D. On voit aussi que la zone d'observation, bien que de bonne qualité de polissage, est bien plus bosselée que dans les cas précédents. Le nombre de lignes de glissement est plus élevé que le cas (112)D, la zone de scan plus petite ($50 \times 50 \mu\text{m}$ au lieu de $100 \times 100 \mu\text{m}$) montrant une densité comparable au cas précédent.

La hauteur de chaque ligne de glissement est plus petite, ce qui rend plus difficile de voir les facettes des plans de glissement que dans les cas (112)D et (110).

En conclusion on constate que dans ce cas, déterminer si le glissement est planaire or non est plus difficile parce que l'émergence des bandes de glissement se fait de manière plus émoussée mais le glissement semble cependant plutôt planaire là encore.

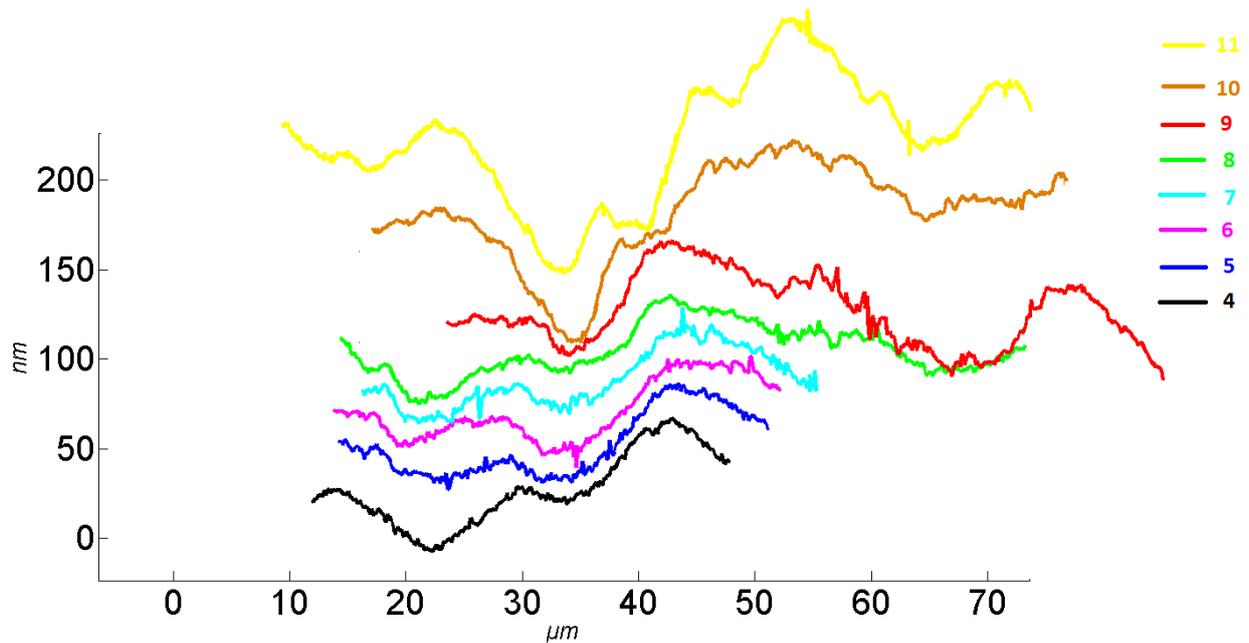


Figure V.09 : Evolution des traces de glissement (112)F, longueur en μm et hauteur en nm

Les profils des lignes rassemblés sur la **figure V.09** confirment que le glissement est bien plus diffus que dans les cas précédents, la principale ondulation sur les profils provenant de l'état bosselé de la surface. Les petites dentelures au long de cette ondulation due au facies indiquent un glissement plus homogène que dans les cas de type (110) et (112)D. La hauteur des lignes de glissement est plus faible que le cas (112)D d'environ une dizaine de nm .

Une part de ces différences est attribuable aux différences d'inclinaison du vecteur de Burgers sur la face d'observation, un paramètre hélas difficile à contrôler sauf à disposer de monocristaux massifs dans lesquels il est possible non seulement l'axe de sollicitation mais aussi l'orientation des faces d'observation.

La suite de ce chapitre rapporte une analyse topologique quantitative dans le cas du glissement de plan (110), qu'il sera instructif d'appliquer également aux 2 types de glissement de plan (112) par la suite. Cette analyse quantitative a fait l'objet d'un article publié en 2013.

TOPOLOGICAL ANALYSIS OF (110) SLIP IN ALPHA-IRON CRYSTAL FROM IN-SITU TESTS IN ATOMIC FORCE MICROSCOPE

C. Kahloun¹, L. T. Le¹, G. Monnet², M-H. Chavanne¹, E. Ait¹, P. Franciosi¹.

¹LSPM-CNRS, UPR 3407, Université Paris 13, 93430 Villetaneuse, France

²EDF R&D, Dept MMC, 77818 Moret-sur-Loing Cedex, France

à paraître dans Acta Materialia, 2013

Analyse topologique du glissement (110) dans un monocristal de fer alpha par essais in situ en microscopie à force atomique.

Résumé en français pour ce mémoire : *des essais de traction in situ ont été réalisés dans un microscope à force atomique (AFM) sur des monocristaux de fer alpha de pureté commerciale pour examiner le processus d'émergence du glissement en surface libre pendant la déformation plastique. L'étude reportée correspond à un cristal dont l'orientation favorise le glissement sur un plan {110}. L'analyse réalisée sur des images saisies périodiquement durant l'essai a permis de collecter des informations sur la planéité et l'hétérogénéité du glissement ainsi que sur l'évolution de cette hétérogénéité au cours de la déformation. Le glissement moyen et la dispersion du glissement ont été déterminés pas à pas, séparément pour chaque bande de glissement de la zone représentative d'observation. Une estimation associée de l'hétérogénéité d'évolution de la densité de dislocations mobiles est également obtenue. Pour les modèles avancées de plasticité intra cristalline basés sur la microstructure qui sont utilisés dans les approches multi-échelles de la plasticité des métaux, il importe de décrire de manière réaliste les processus intra cristallins du glissement qui est rarement homogène même en glissement simple comme il est fréquemment simplifié.*

Abstract – In situ tensile tests were performed inside an atomic force microscope (AFM) on commercially pure alpha iron single crystals to examine the process of emerging slip at a free surface during plastic straining. The reported study corresponds to a crystal orientation which favors slip on a {110} plane. The performed statistical analysis on periodically stored images during the test allowed to collecting information on the planar and heterogeneous nature of slip as well as on the evolution of this heterogeneity with strain. The average slip and the slip dispersion were step-wise estimated separately in each of the slip bands in the crystal representative observation zone. An estimate of the related heterogeneous evolution of the mobile dislocation density is also obtained and some underlying hardening features are also commented. For the advanced microstructure-based modeling of intra-crystalline plastic behavior actually used in multi-scale computational approaches of metal plasticity, it is of interest to relevantly describe the intra-crystalline slip process which is hardly homogeneous even in single slip mode as frequently simplified.

Keywords – slip topology, crystal plasticity, AFM surface characterization, BCC metals.

1. Introduction.

Experimental investigations of slip and related micro-structural features in metal crystals are used since a long time to associate X-ray diffraction with microscope observations, whether they be optical or electronic (SEM or TEM), ones [1-7]. Mechanical characterizations from Atomic Force Microscope (AFM) are more recent [8-12] and in-situ experiments in AFM are still scarce compared to the many micro-machines now installed in SEM, TEM and X-Ray devices. In the context of crystal plasticity, the AFM in-situ experiments allows to studying with high resolution the characteristics of emerging slip during plastic flow. They are likely to provide both qualitative and quantitative information on crystal plasticity either at the subscale of elementary mechanisms or at the larger scale of a representative surface element. In [11] for example, AFM in-situ experiments were used to identify the underlying dislocation mechanisms responsible for a so called “atypical boomerang-like slip traces” in niobium crystals. As is shown in that work, direct AFM observation of slip traces can provide deep insights on crystal plasticity down to the dynamics of the dislocation behavior. In the present work, also concerned with global plasticity features resulting from elementary slip processes as in [12], quantitative information concerning the spacing and the height of slip lines has been obtained making use of an appropriate method for data analysis that was to be settled first.

In the previous investigation on poly-crystalline ferritic steel [12], it was shown that a measure of intra granular slip was possible from AFM observations, combining the follow up of the lattice

orientation with the determination of two topographical parameters which characterize slip. A treatment method was therefore settled in order to obtain these two parameters with good enough accuracy. The method is applied in the present work to examine the (110) slip process in BCC alpha iron single-crystals, with the goal of obtaining useful information regarding microstructure-based metal plasticity modeling. The choice of alpha iron for this investigation is motivated by both academic and applicative interests since on the one hand, plasticity mechanisms of BCC crystals are not as well understood as those of FCC crystals and, on the other hand, ferritic steels are intensively used in industrial contexts, from fluid and gas transport to power plant equipments and structures [13-16].

The here examined data result from a typical AFM in situ tensile test performed at room temperature up to 8.5% plastic strain. The sample straining was periodically stopped a couple of minutes such as to scan successive images of an initially selected square surface (of $10^4 \mu m^2$ area) and to store them for subsequent image analysis. The stored information was then treated to extract three parameters: the step height of a slip band (i-e the emerging slip amplitude per slip band), the emerging angle of the slip bands (with regard to the relative orientations of the sample and of the active slip system) and the angle of the (material) rotation of the sample with regard to the device or observation frame. The reported work in this paper first shows that considering these topographical measures with the information on the crystal orientation provides access to an estimate of the local distributions of slip in the slip bands and to a comparison of their evolutions with the one of the macroscopic slip. The performed analysis on these data allows to clarifying several features of crystal slip such as slip planarity and the deviation amount from planarity, random versus organized nature of the emerging slip process or relative contributions between the increase of slip in each slip band and the broadening of the bands. Some unexpected features concerning the slip heterogeneity evolution with strain are pointed. The measured parameters from the emerging slip analysis further yield an estimate of the related evolution of the mobile dislocation densities in the bands, to be compared with the globally estimated one. These heterogeneity and local features of crystalline plasticity are still thoroughly questioned [17-21] for BCC as well as for FCC metals, in different temperature ranges since they are generally temperature-dependent. One main objective beyond a better understanding of the involved mechanisms is to specify to which extent they matter in microstructural and/or multi-scale modeling of plastic flow and work hardening in metals [22-28], also in comparison with more recent examinations of dislocation interaction features from dislocation dynamics or molecular dynamics simulations [29-33].

Section 2 summarizes the experimental details. Section 3 describes the methodology for the image analysis and presents the measured topological parameters. Section 4 discusses the results in terms of slip and mobile dislocation density evolutions. Section 5 concludes.

2. Material, experimental procedures and image data characteristics.

This section presents the tensile test as well as the sample characteristics and describes the measurement method for the topological parameters. The active slip system to be analysed is identified from comparing the observed slip traces on the sample with the expected one from the systems of highest Schmid factors.

2.1. The material.

Large and flat iron crystals have been grown by a solid re-crystallization route, applying the critical strain technique on rolled ingots of cast ARMCO iron. The impurity content (0.14% weight) is reported in Table 1.

C	Mo	Si	P	S	Ti	Cr	Mn	Cu	Ni	Al	N	Va	Sn	Pb
0.0026	0.001	0.004	0.002	0.0047		0.016	0.080	0.009	0.011	0.002	0.006		0.002	

Table 1: chemical elements in ARMCO commercial iron (% weight).

Once appropriately machined for intense rolling to reach the final reduction amount of 94-95%, blades are cut to the dimensions of 300x45x1.5 mm³ for a 1 hour annealing at 800°C (10⁻⁵ mbar). Third, each specimen is strained (0.2 mm/min) in tension at room temperature until the end of the through-sample propagation of Piobert-Lüders bands. At last, the large crystal growth is performed by traveling the metal blade at 7.5mm/h in a vertical oven through a temperature gradient of 20°C/cm up to 850°C (10⁻⁵ mbar). Chemical attacks for micrographic observations and lattice orientation of grains are performed using a mixture of nitric acid 10% and 90% ethanol. The individual grain orientations are determined by the X-rays back diffraction method of Laüe, within 2-degrees of accuracy. At the end of the process, the blade is a multi-crystalline sample with some large enough grains to spark-cut flat standard samples for tensile tests with a gage of 11mm length and 2x2mm² cross section. The electro-polished flat sample surface for slip observation has residual roughness (height variation on the observed area) of $R_t = 1.72 \mu m$. The carbon content is not modified.

2.2. Sample orientation and characteristics.

The prepared sample is oriented for tension along the crystallographic direction $\vec{T} = (\bar{3}7\ \bar{5}\ 26)$ and its main surface has crystallographic normal $\vec{N} = (\bar{6}\ 8\ 7)$. The Schmid factors of the main slip systems have been calculated for both {110} and {112} planes. With regard to the crystal

orientation drawn in Figure 1a, (the reference triangle is $\langle 100 \rangle \langle 101 \rangle \langle 111 \rangle$) two collinear slip systems (i.e. sharing the same Burgers vector) have a high Schmid factor, given in Table 2 (these systems are referred according to the notation introduced in [5]). The $\{112\}$ plane is sheared in its hard direction.

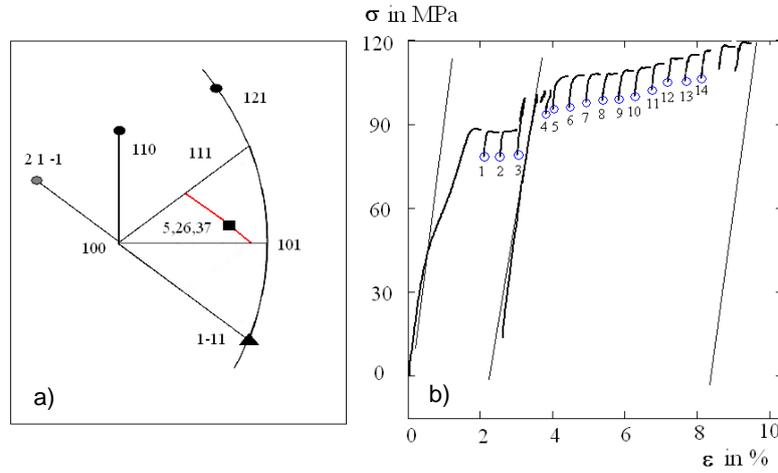


Figure 1: (a) The crystalline and potential slip system orientations of the sample (the red line indicates the sample face orientation); (b) The related tensile stress-strain curve.

Slip direction \vec{m}	Slip plane \vec{n}	Schmid Factor	System Notation	$\beta = (\vec{N}, \vec{n})$
(1-11)	(110)	0,48	6D	83°
(1-11)	(121)	0,49	4"D	55°

Table 2 : main Schmid factors and slip system parameters.

2.3. Topographic measures by atomic force microscopy (AFM).

The AFM in situ tensile test is performed at room temperature at the strain rate of $1.5 \cdot 10^{-4} / s$. The stress-strain curve is plotted in Figure 1b. The final plastic strain is $8.5\% \pm 0.25\%$.

The AFM is used in contact mode in order to measure the surface topography as follows: a sharp (e.g. a few atoms) probe tip is fixed on a cantilever end. This cantilever is connected to piezo-electric quartz which allows the horizontal displacement of the probe along two directions x and y . The probe tip is brought at contact of the surface by vertical displacement along a z axis. The contact force F is applied by the operator. When the tip is moved in the (x,y) plane from one position to a nearby one, the contact force varies owing to the surface roughness and two measures are collected: the force variation ΔF and the tip height variation Δz from the vertical position z , related to the force initial value F . The data Δz over all (x,y) points yield a first image of the

examined surface which is a topographic image. The data ΔF over all (x,y) positions on the analyzed surface define a second image which is the gradient of the topographic image, with high values corresponding to the loci of large variations in height along z . We here call it the “image derivative”. The uncertainty of the measure along x and y , which results from the image resolution, is $\pm 0,2\mu\text{m}$. In the z direction the resolution is of a tenth of a nanometer.

Images for topographic measurements have been stored at 17 successive stages along the test, the 14 first of which have been analyzed. Each storing event corresponds to a relaxation of the applied stress, for the strain needs be kept constant meanwhile the data acquisition which usually lasts a few minutes. The plastic strain steps from one image to the next one are of similar amplitude but not all equal. Images were shot when the continuous observation of the examined domain on the screen revealed “something occurring” (slip intensification, band broadening, new traces...). The noticeable drop on the curve between images 3 and 4 corresponds to a one-day sample unloading to free the AFM for another use (the sample has been unloaded but kept installed in the tensile machine which has been removed from the AFM). This drop does not affect the curve slope which corresponds to a low hardening modulus of approximately $\mu/1500$, what is consistent with easy single slip in BCC crystals, and does not affect the present topology analysis either.

2.4. Image data characteristics.

Figure 2a shows the topographic image at 5.3% strain and Figure 2b shows its image derivative.

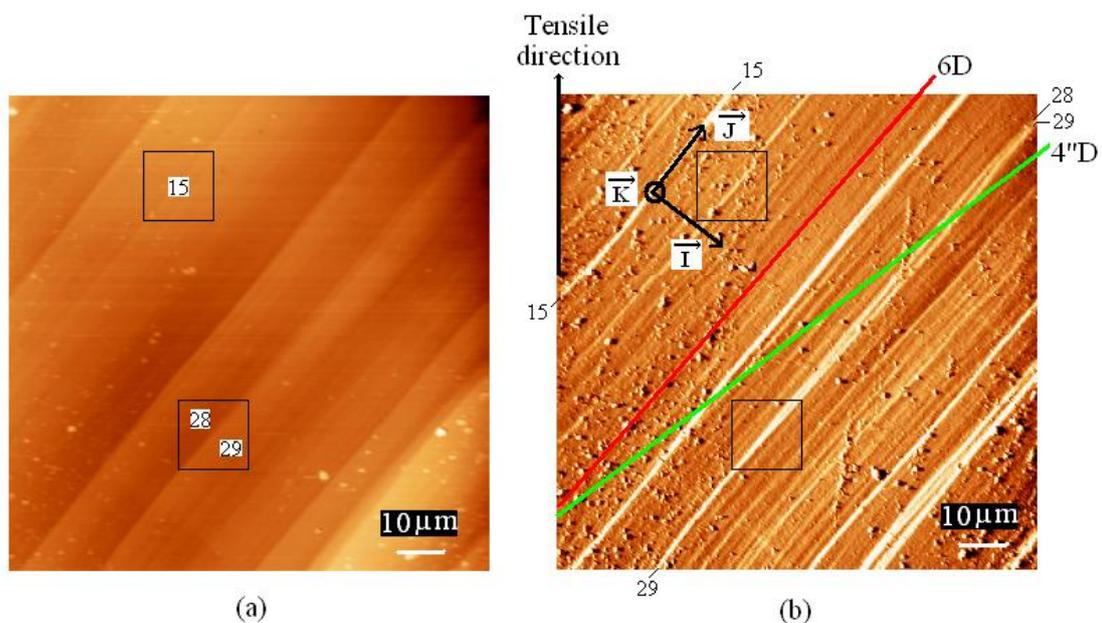


Figure 2 : (a) Example of topographic image at 5.3% strain ; (b) The related image derivative with calculated traces for the slip systems $6D$ and $4''D$. Vectors $\vec{I}, \vec{J}, \vec{K}$ indicate the selected macroscopic frame. The square pair indicates the two zones examined in the following.

The tensile axis is vertical. On the topographic image, the sample surface appears shared into parallel stripes by quite straight and dark lines. Such straight lines are a planar slip signature. The color graduation in the stripes, which is parallel to the dark lines, represents the height variations between lines which are due to parallel slip steps constituted with successive planar long and narrow facets. On the image derivative, the white lines of variable thickness indicate the loci of maximal slope for each successive slip step. The higher the slip step is, the broader and brighter the related white line appears. What we here call “slip step” is most often the 3D equivalent of what is usually called a slip band in 2D views. Yet, as will be seen, bands can correspond with a single step or a multiple step. As each slip step is made of a series of parallel slip lines, a slip step as here defined is also made of a series of more elementary steps at the scale of a few crystallographic planes. In the present situation of single slip, slip lines in the steps and in the band are parallel to the slip band. The level of individual slip planes being not considered in this work we will call “slip lines” (or lines for short) the white lines of maximal slope representative of the slip steps. Slip bands, steps and lines here have a common “slip trace” (up to some local cross slipping events). Figure 2b also reports the theoretical orientations of the slip traces for the two slip planes of the systems 6D and 4’’D. The observed slip lines are found to match with the trace of the (110) plane and far from the (112) trace although the latter system has a slightly larger Schmid factor. Anticipating on investigations to be reported in a dedicated paper, it is noteworthy that i) the plastic strain is clearly of single planar (110) slip type, without waviness, consistently with molecular dynamic simulations [31], and ii) the absence of deviations on the nearby and more highly stressed collinear (112) plane signs a larger critical shear stress (at room temperature) on the $\langle 111 \rangle (112)$ systems in their hard direction than on $\langle 111 \rangle (110)$ systems.

3. Treatment of AFM data.

This section briefly describes the typology of the observed slip steps and related slip lines (and bands). Basically, it distinguishes single-step lines (bands) and multiple- (mostly double-) step ones. A simple mechanism has been described for the creation of the individual steps which allows to characterizing them with two topological parameters, the height Δh and the emergence angle α of the step. It is shown that the slip amount in each slip step (and thus in each slip band) can be calculated from these two parameters, provided the crystal orientation. We will make use of the drawn $(\vec{I}, \vec{J}, \vec{K})$ frame in Figure 2b as the macroscopic sample frame, taking \vec{J} parallel to the slip lines and \vec{K} along the surface normal.

3.1. Slip step description, scheme of the slip step process.

Figure 3 shows 3D views of two parts of typical slip steps as appearing at 5.3% strain: they are respectively numbered 15 and 28-29 and they correspond to the rectangular zones shown on Figures 2a and 2b. The slip lines as defined (e.g. the locus of most intense slope on the steps) are represented by the red thick line.

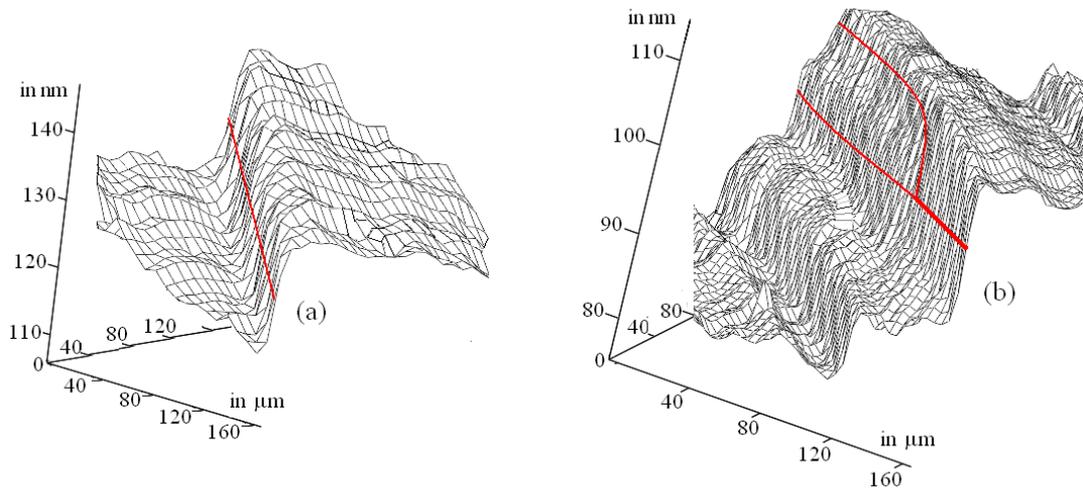


Figure 3: (a) 3D views of single step 15 and (b) of double step 28-29 with slip line branching.

The more common (70%) line type is the single-step line as the one on Figure 3a. Its average width is 900 nm, corresponding roughly to 4000 atomic planes of type (110). If the slip is heterogeneous at the scale of a few atomic distances, it is quite homogeneous at the step scale and the step appears to have a nearly constant slope. Multiple steps happen less frequently (30%), with essentially double steps as the 28-29 one shown in Figure 3b. A line profile can evolve from single to double or multiple step type, as is the case for line n°29. The double step of Figure 5b appears at the branching point on lines 28-29 as indicated in the square domain of Figures 2a,b.

In double steps, the slope of the first step is always larger than the slope of the second step. The formation of a second step ahead of a single step is probably related with some local cross slipping from the initial step.

Single and double-step processes have been analyzed and described. The slip mechanism which yields to the formation of a single step is sketched in the following, with the help of Figure 4 which presents a cut view normal to the slip line: before plastic straining, the slip step does not exist and both step edges (the beginning and the end of the step) are in continuity, with a same slope which is supposed to be at horizontal.

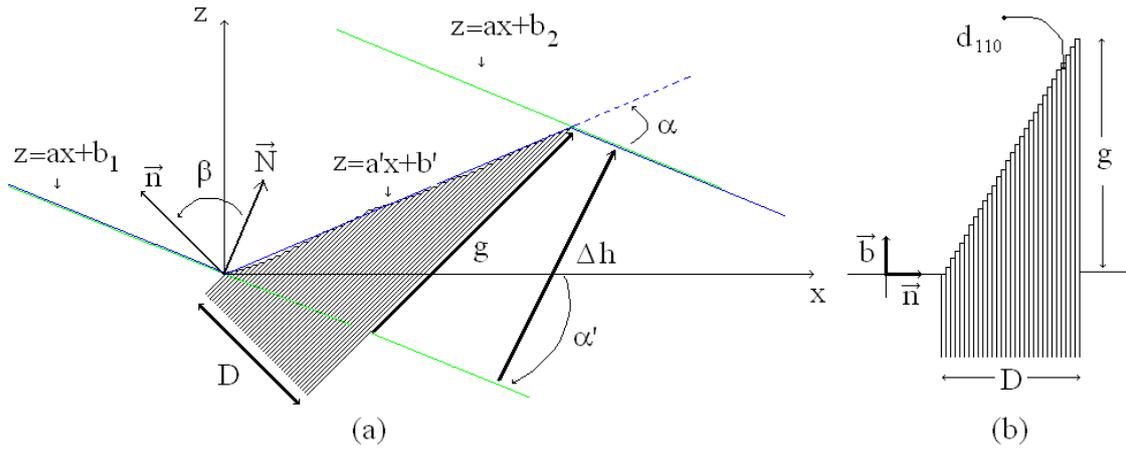


Figure 4: (a) slip mechanism of a single slip step with definition of the topographic parameters Δh and α ; (b) Section of the step parallel to the plane (\vec{n}, \vec{b}) with definition of the cumulated displacement g and of the band width D .

When slip emerges, the step appears, with a beginning and an end which become misaligned as shown on Figure 4a where the origin of the x, y, z frame is located at the beginning of the step. Yet, both sides of the step rotate from a same angle α' due to the prohibited displacements of the sample ends clamped in the tensile machine⁸. The step height can be defined as $\Delta h = \frac{b_2 - b_1}{\sqrt{1 + a^2}}$ with b_1, b_2 the

heights at origin of each two limit slopes. The angle α which characterizes the emerging step is the angle between the slope a' of the step climb ($z = a'x + b'$) and the slope a of the surface on the sides of the step ($z = ax + b_i, i = 1, 2$). Orientation measurements provide access to angle β between the sample surface normal \vec{N} and the slip plane normal \vec{n} (Table 2). Lets then denote g the cumulated displacement by all the crystallographic planes of the step in the direction of the Burgers vector. On Figure 6a, g_p is the projection of g on the section (x, z) . The band width D is the piled slip planes of the slip band which then reads:

$$D = \frac{\sin(\beta - \alpha)}{\sin(\alpha)} \Delta h \quad (1).$$

With θ the angle between the slip line and the Burgers vector, we obtain:

$$g = \frac{\Delta h}{\sin(\theta) \cdot \sin(\beta)} \quad (2).$$

The slip inside the slip band of thickness D is defined as:

$$\gamma = \frac{g}{D} \quad (3).$$

⁸ The calculations make use of a linear regression between the points at both edge of each step according to a condition of common slope at these points.

With regard to the uncertainty of the measure on x , y and z , and to the initial surface roughness, the emerging slip is hardly detected before Δh being “large enough”, what typically demands a 6nm height in the present case. So, slip cannot be estimated for steps with $g < 18nm$. This yields a threshold to detect plastic slip on a sample surface, which corresponds to typically 70b from the emerging dislocations (for a Burgers vector $b \approx 2,5A$).

The analysis of a double step as the one shown in Figure 3b consists in decomposing it in two simple steps and then in calculating the parameters Δh and α for each simple step part.

3.2. Image treatment method.

Topographic parameters α and Δh as defined in Figure 4 can be measured on a mean profile of the steps, perpendicularly to the slip lines. The AFM images are treated in order to obtain such a mean step profile of each line. This mean profile is the average of all the cuts perpendicular to the slip lines. Two methods described in [12] were applied in the present case. The first method [34] uses a median filter in a 1D window sliding parallel to the average slip line orientation. This method is not convenient because the slip lines have a varying orientation (due to the surface roughness and defects) and the step profile is modified by the treatment. The second method calculates a distance function from the trace of each slip line, using the Danielson algorithm [35] and then provides the mean height on the level lines of this distance function. This mean profile obtained is adapted individually and identically to each slip line. All the slip steps were so treated in order to follow the previously described parameters all along the tensile test. A series of mean profiles is exemplified in Appendix for the steps n°15, 9, 10, 28 and 29 at macroscopic plastic strain of $\varepsilon = 5.79 \%$, 6.71% and 7.63% respectively.

Although the median filter method was not appropriate to calculate the needed topographic parameters in this study, Figure 5 shows the kind of synthetic view its use can provide for the successive step profiles during the tensile test. On this figure, the “i” index runs from 1 to 14 for the successive profiles at different strain levels and the “j” index runs from 1 to 38 for the slip bands on each profile. Such a plot indicates qualitatively the kind of heterogeneous feature which characterizes the slip evolution on the surface, the quantification of which is performed in the following from the Danielson method. For each (i,j) pair as defined in Figure 7, we will now denote $\Delta h_{i,j}$, $\alpha_{i,j}$, $g_{i,j}$, $D_{i,j}$ and $\gamma_{i,j}$ respectively the step height, the emerging angle, the cumulated displacement in the slip direction, the band width and the slip amplitude in the band.

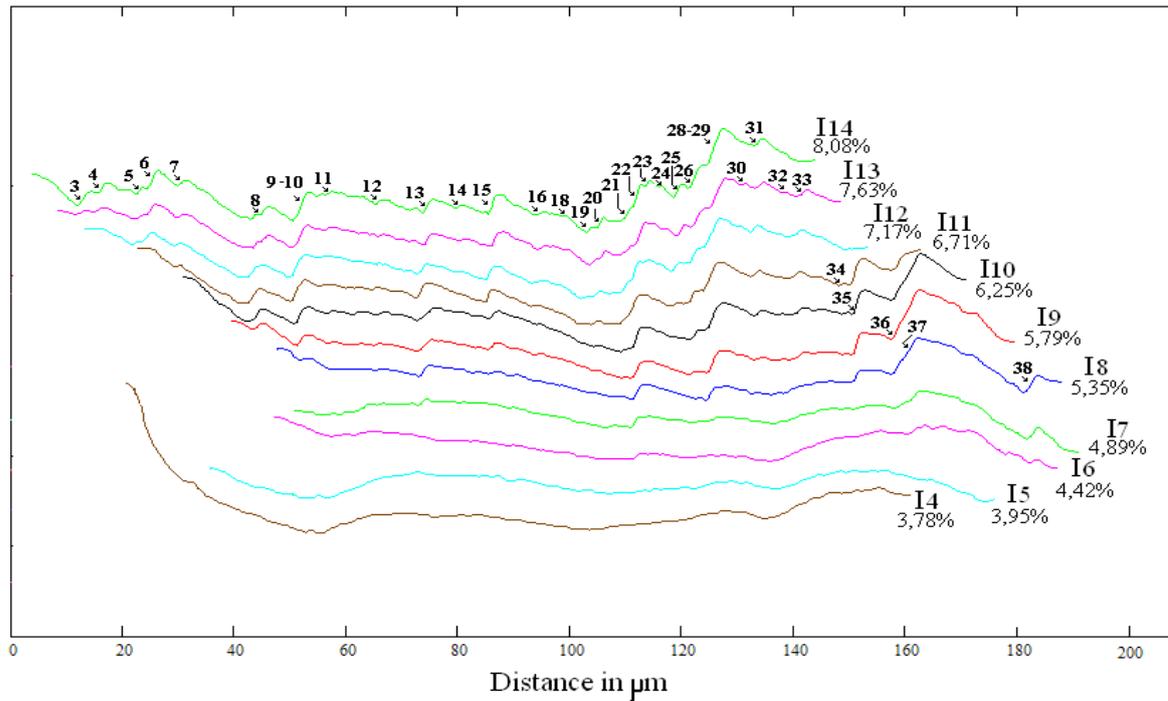


Figure 5: step profiles obtained by median filtering. The picture also defines the (i,j) indexing for the step profiles at each strain level and for the slip bands on each profile.

Figure 5 also provides additional useful global information to perform the quantitative analysis. It shows that:

- the measure field moves with increasing strain such that only a part of the slip bands, between $n^{\circ}8$ and $n^{\circ}31$ in that case, can be followed along all the investigated strain path and appears on the successive profiles to be comparably analyzed in all the measured fields;
- no emerging slip is observed in the observation zone before 4.4% of plastic strain accordingly with the observation of the first steps on the topographic images. Prior to this strain, the slip activity is of course observable on the surface elsewhere but the heterogeneous spreading over the surface has delayed up to 4.4% of macro-plastic strain, the slip emergence in the observed zone.

The reported topographic image on Figure 6a at 3.95% strain shows that thin lines are already present in the observation zone with a $2.2\mu m$ mean spacing. Reporting this thin line network on Figure 6b and then superimposing it to the slip pattern at 5.3% strain Figure 6c shows the coincidence between the more intense of these thin lines with the emerged steps.

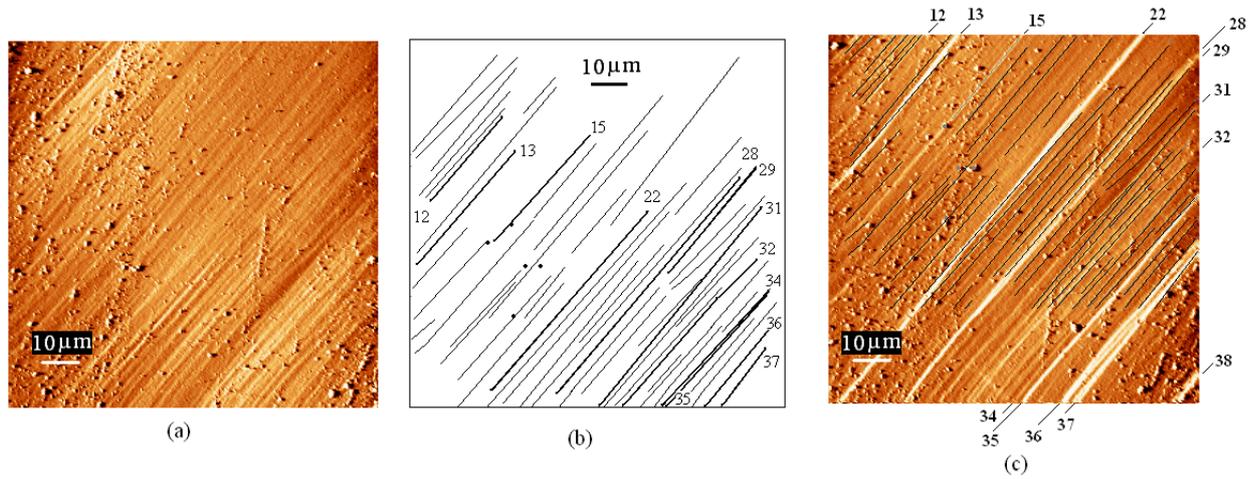


Figure 6: (a) thin slip lines on topographic image n°5 at 3.95% strain; (b) extracted thin lines from the topographic image (a); (c) superimposed thin slip lines with the image at 5.3% strain.

4. Slip evolution, fluctuations and heterogeneity, mobile dislocation density evaluation.

In this section, it is established that:

- the crystal volume on which the topographic measures $\Delta h_{i,j}$ and $g_{i,j}$ are performed is a representative volume of the crystal, although the smallness of the observation zone.
- the topographic measures yield a consistent estimate of the macroscopic slip.
- The slip analysis performed line by line allows us to characterize qualitatively and quantitatively the slip heterogeneities and its evolution with the macroscopic strain.
- Owing to the connexion between slip activity and collective dislocation mobility, an estimate of the related mobile dislocation densities in each slip band is finally provided and their evolutions are discussed.

4.1. Observation domain of slip and related material volume. Slip measurements and consistency.

The observation field and the measure fields need to be distinguished clearly before analyzing the data. The observation field has dimension l_0^2 , with $l_0=100\mu m$. Under the assumption that all observed lines join both edges of the sample surface, with comparable slip activity on all of them, the measure field is a volume shown on Figure 7a,b. This volume has been calculated to equal 2% of the sample volume.

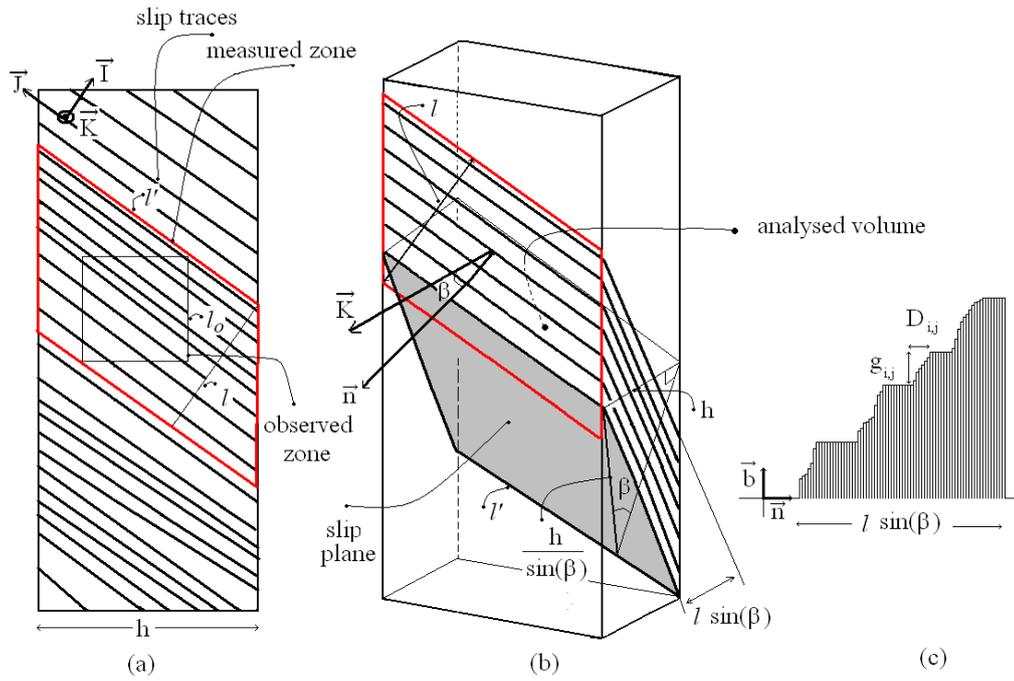


Figure 7: (a) Observed and measure fields; (b) Analyzed volume; (c) Section of the measure field along the (\vec{n}, \vec{b}) plane.

The slip amplitude at each strain stage ε_i can be calculated as the ratio of the sum of the displacements to the thickness $l \sin(\beta)$ of the pack of planes between the first and the final slip band of the measure field (see Figure 7c), say:

$$\langle \gamma \rangle_i = \frac{\sum_j g_{i,j}}{l \sin(\beta)} \quad (4).$$

The consistency of this slip estimate with the measured strains is now examined.

Figure 8 plots ε versus $\langle \gamma \rangle$ together with the relation obtained in using the Schmid factor (0.48) of the slipping system which perfectly matches with the delayed plastic strain $\varepsilon' = \varepsilon - 0.044$ in the observation field which only appears at 4.4% of macroscopic strain ε .

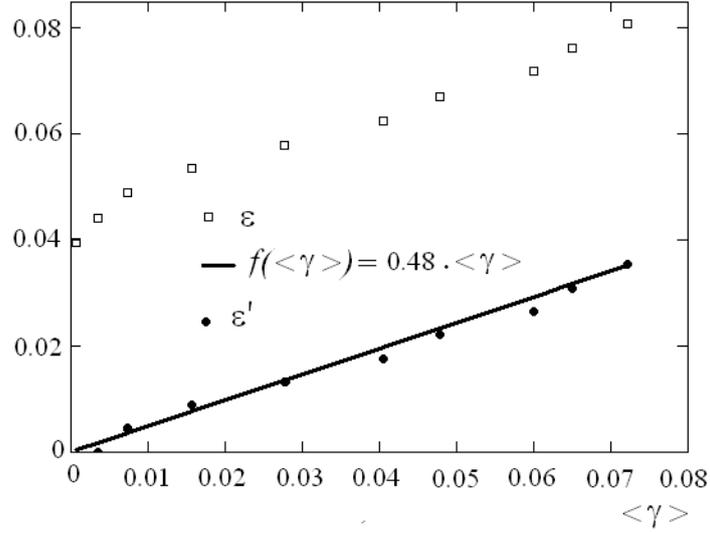


Figure 8: Consistency between slip $\langle \gamma \rangle$ and strain ε .

It is so established that, although the slip in the observation field appears with a significant delay compared to the macroscopic onset of slip, once it has appeared it locally increases at the same rate as globally. The decay in the onset of plastic slip is in agreement with heterogeneous slip activity along the sample, even if thin homogeneous lines seem to appear early. Significantly emerging lines appear first at some weaker places along the sample, and due to the resulting local hardening, slip progressively spreads towards slip-free zones.

4.2. Measure of individual slip per lines. Slip fluctuations.

Figure 9a reports the evolution of the band widths $D_{i,j}$ with the plastic strain. It also reports the mean value $\langle D_i \rangle = \frac{1}{n_i} \sum_j D_{i,j}$ of the band widths at each strain where n_i is the number of active bands for each strain level ε_i . n_i evolution versus ε_i is shown Figure 9c.

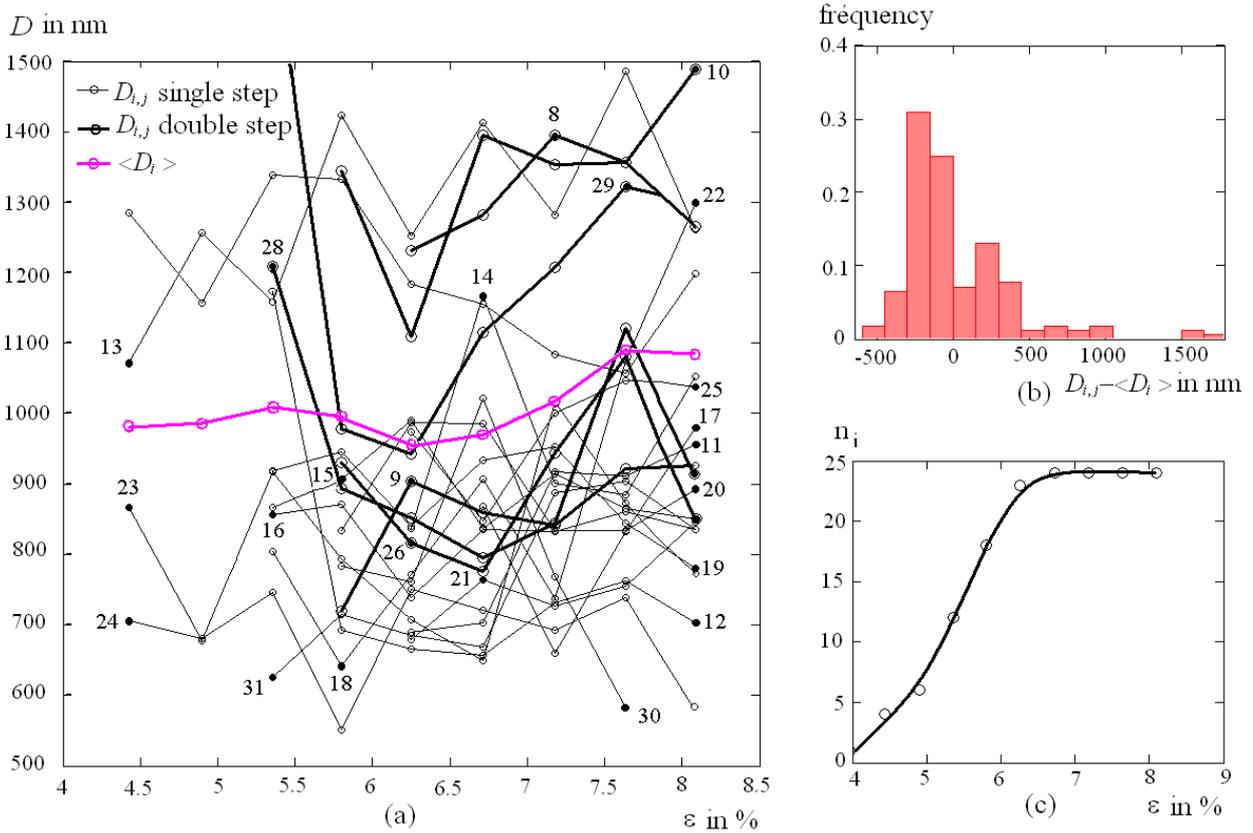


Figure 9: (a) Evolution of band width with the macroscopic strain ; (b) Distribution of the deviations of the band widths from their mean value at each strain stage ; (c) Multiplication of slip bands with increasing plastic strain,

The values $D_{i,j}$ remain nearly constant with strain. The dimension of $\langle D_i \rangle$ is typically of $1\mu\text{m}$. In contrast, the values $D_{i,j}$ significantly vary from one slip band to another, as shown by the histogram of Figure 9b which cumulates the distribution of the deviations $D_{i,j} - \langle D_i \rangle$ of the band widths $D_{i,j}$ from their average value $\langle D_i \rangle$ at each strain stage i . The values $D_{i,j}$ appear consequently determined by the conditions of the slip band formation, say by the conditions of dislocation creation and motion in the crystal.

Figure 9c shows that the number n_i of active slip bands increases with strain up to 6.2% to remain nearly constant above this value.

Thus, while at first, the plastic slip requires slip band multiplication, when the band number becomes large enough, the strain results from the cumulated displacement $g_{i,j}$ of each band, the widths $D_{i,j}$ staying nearly constant. $g_{i,j}$ displacements are plotted versus strain in Figure 10a, with thin and thick lines for the single and the double steps respectively. This Figure 10a also reports the

$$\text{mean value } \langle g_i \rangle = \frac{1}{n_i} \sum_j g_{i,j} .$$

The study of the distribution of these displacements provides the same comments and results as the study of the band width (two distinct components in the histogram of deviations to their mean value and high dispersion of the $g_{i,j}$ values).

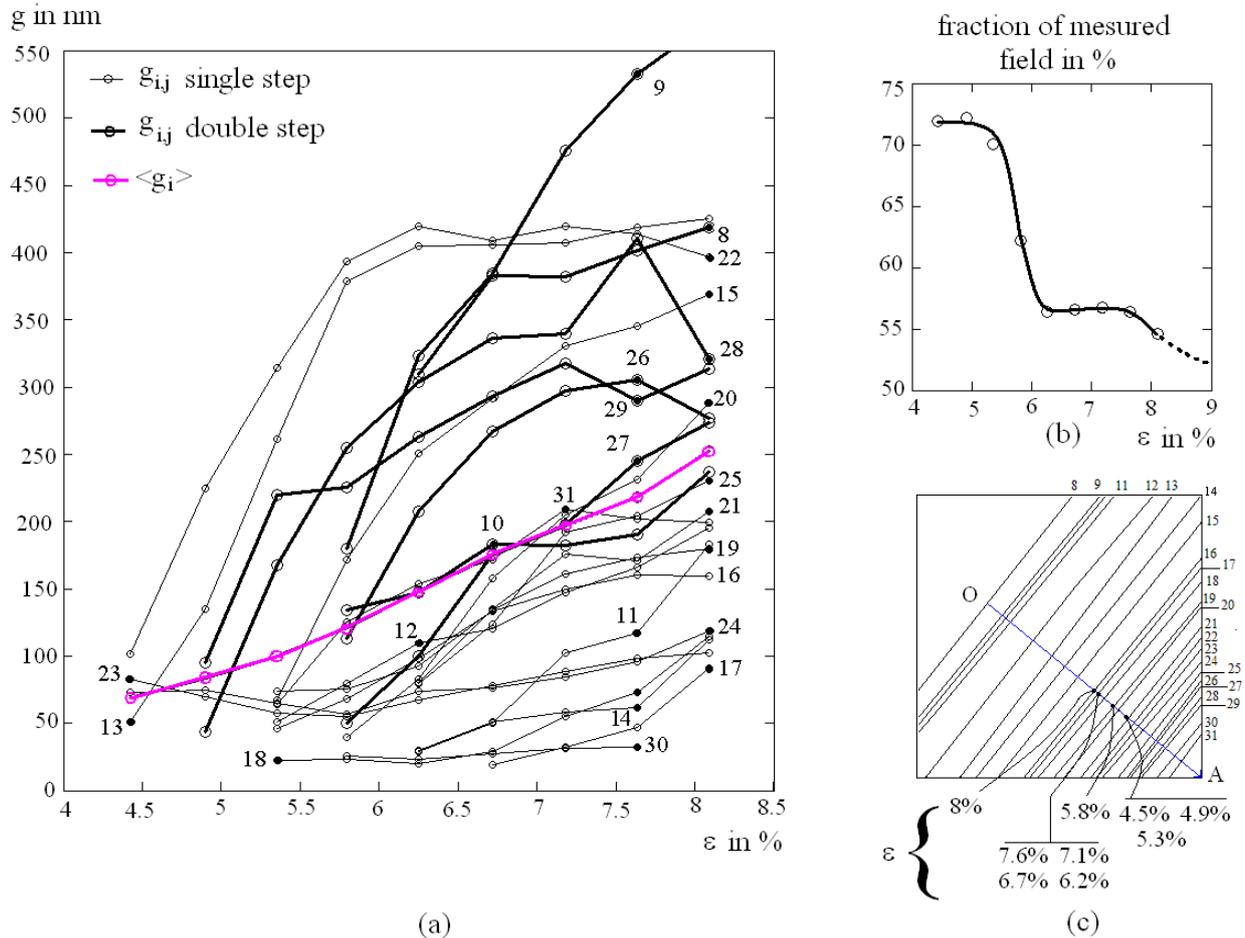


Figure 10: Evolution with strain of (a) the cumulated displacement of the slip bands, (b) and (c) of the position of the slip band barycentre.

Additional information is obtained after considering the heterogeneity of the $g_{i,j}$ displacements in terms of the spatial heterogeneity of the microscopic strain. In order to clarify why, while the slip bands appear at different strain stages, the slip band spacing remains irregular we link the cumulated displacement measures $g_{i,j}$ with the spatial distribution of slip bands from calculating the barycenter of slip bands position weighted by cumulated displacement value.

The calculated barycenter of all the bands weighted by their individual cumulated displacement is plotted versus strain in Figure 11a in terms of measure zone spread percent. The plot clearly shows the motion with increasing strain of the barycentre towards the centre (say towards 50%) of the measured field. Figure 11b shows the successive positions of this barycenter on the measured field itself, as it appears on the last examined micrograph. This motion of the barycenter position with

increasing macroscopic strain indicates that although the spatial heterogeneity of the slip bands does not progressively vanish, the overall carried strain does homogenize. This strain homogenization appears to result from a kind of spatial heterogeneity re-equilibrium of the slip bands by the slip intensity inside the bands rather than, as one could have expected, a homogenization process of the initially heterogeneous spatial distribution of the bands together with slip homogenization in all of them.

Figure 11a shows the evolution for the macroscopic strains ε_i (say with the strain denoted ε) of the $\gamma_{i,j}$ slip in each band j , with the related histogram in Figure 11b. The mean band slip $\langle \gamma_i \rangle$, defined

as $\langle \gamma_i \rangle = \frac{\langle g_i \rangle}{\langle D_i \rangle}$, is also plotted, together with $\langle \gamma \rangle_i$ (denoted $\langle \gamma \rangle$) the mean slip in the

examined crystal element as defined from Eq. (4). The relation of $\langle \gamma \rangle$ to $\langle \gamma_i \rangle$ (the mean band slip is the mean slip over the plastically active part of the examined crystal element) reads $\langle \gamma \rangle = \langle \gamma_i \rangle \cdot f_P$

with $f_P = f_{P_i} = \frac{1}{l \cdot \sin(\beta)} \sum_j D_{i,j}$ the plastically active fraction of the examined crystal element at the

current strain $\varepsilon = \varepsilon_i$.

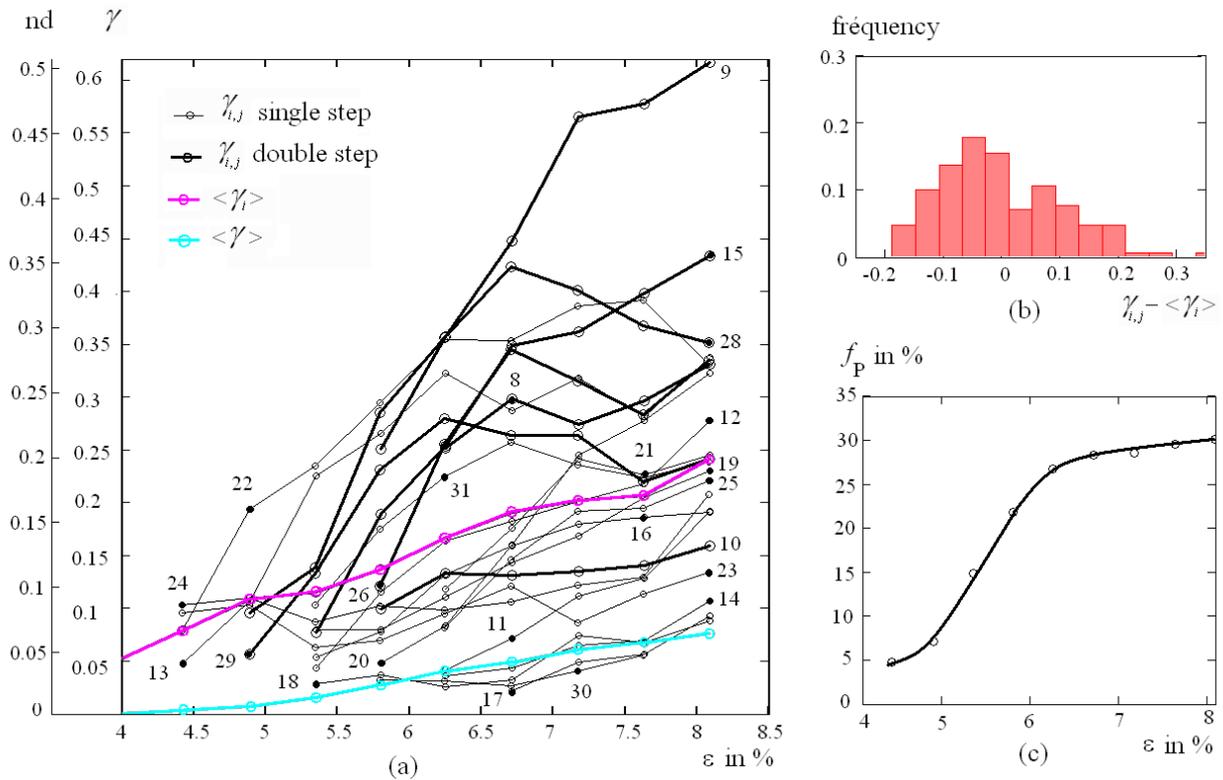


Figure 11 (a) Evolution of slip in each band with the macroscopic strain ; (b) Distribution of the standard deviations of the individual slip amplitudes from their mean value ; (c) Evolution with strain of the plastically active fraction of the examined crystal element.

As shown in Figure 11c, f_p increases with ε up to 6.1% as the number of slip bands increases and tends to remain constant as the number of slip bands becomes constant.

Figures 11a and 11b yield results similar to those provided on Figures 9 and 10, the strong heterogeneities of slip from band to band and the existence of two types of bands.

The single step and double step bands appear as thin and thick lines respectively on Figure 11a. They clearly appear as two distinct slip bands populations. According to the slip band typology reported previously, single step bands and double step bands can explain the two components of the histograms on Figures 9b and 11b.

Three different types of bands with three specific slip evolutions are noticeable in the whole set of plotted curves:

- (a) Slow then fast slip increase, is denoted SF band;
- (b) Fast-slow-fast or slow-fast-slow slip increase, is denoted FSF or SFS band;
- (c) Fast then slow slip increase, is denoted FS band.

After treatment in order to extract the main quantitative features of their evolution⁹, these three types of curves are plotted in Figures 12a,b,c, together with average band slip value $\langle \gamma_i \rangle$ and the average slip values for each type of curves noted $\langle \gamma_{1i} \rangle$, $\langle \gamma_{2i} \rangle$, $\langle \gamma_{3i} \rangle$.

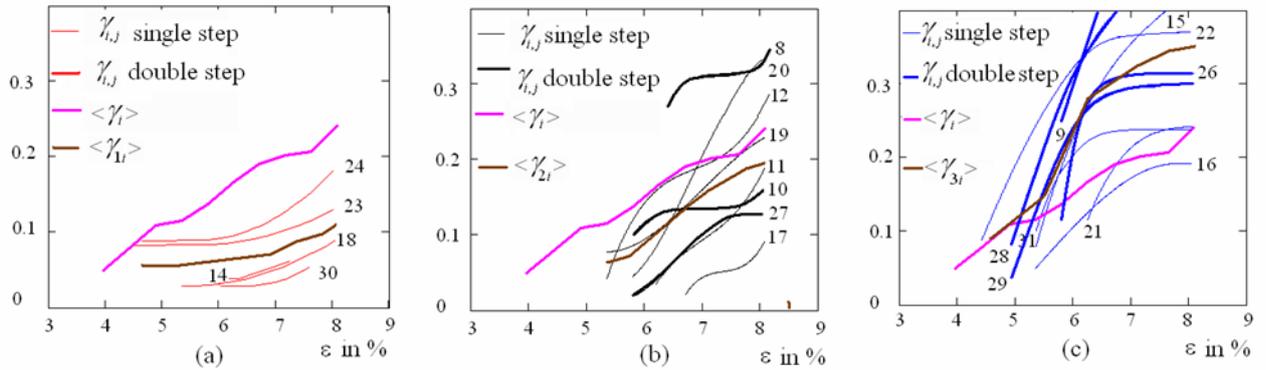


Figure 12: slip evolution types (a) SF bands; (b) FSF/SFS bands ; (c) FS bands

⁹ Polynomial regression of degree 3 with the constraint of a prohibited decrease of slip (non negative first derivative).

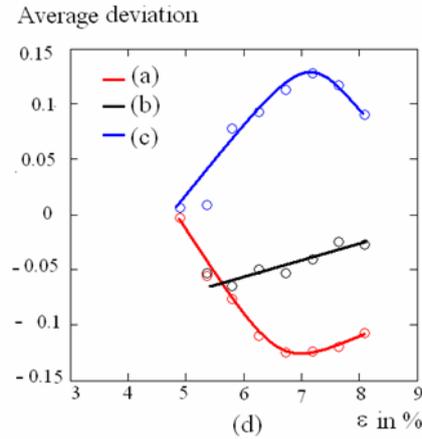


Figure 12 (d): average deviations of the three types of band slip evolution.

The three slip evolution types appear below, near and over the average band slip value. The evolution type FSF/SFS looks like a fluctuation of the microscopic slip with regard to an average value. The SFS/SFS bands strain fluctuation period is 2,5%. Figure 12d plots the deviations $\langle \gamma_{1i} \rangle - \langle \gamma_i \rangle$, $\langle \gamma_{2i} \rangle - \langle \gamma_i \rangle$, $\langle \gamma_{3i} \rangle - \langle \gamma_i \rangle$ versus strain for each of the three evolution types: for SF and FS types, the average deviation increases when the number of slip bands increases and when the band number becomes constant, the average deviation decreases. This evolution occurs in a 3.5% strain interval; For SFS/SFS type, the average deviation decreases slowly to zero.

It is noted that no double step line belongs to the (SF) type. The double steps contribute to both the (SFS/SFS) and (FS) types,

Back to Figure 11a, the y axis is also graduated in terms of $nd_{i,j} = \frac{\gamma_{i,j} d_{110}}{b}$ that represents the number of emerging dislocations for a slip band per unit atomic plane. This number ranges between 0.02 and 0.5, corresponding to 50 atomic planes for one emerging dislocation at the smallest value and 2 atomic planes at the largest value. This indicates a heterogeneous slip in the slip band at the scale of a few atomic planes. However the size of our volume element is too small for a quantitative analysis of this intra band heterogeneity.

Now, the spatial repartition of the bands and their behaviour are connected to the underlying mechanisms of dislocation creation and motion. The performed slip measurements at the individual band scale allow an access to an estimate of the mobile dislocation densities that are responsible for the slip activity in the bands.

4.3. Evolution features of the mobile dislocation density.

This section discusses how the analysis of the experimental results obtained in this work allows also for the estimate of the mobile dislocation density ρ_m within every slip band and of their evolution with strain. Heterogeneous features are pointed. First, we consider plastic deformation during every strain step to be stationary and homogeneous within every slip band. It is known that the dislocation velocity depends only on the effective stress. Since strain hardening observed on the stress strain curve is rather low, dislocation storage is thus low and the effective stress can be considered constant. Consequently, when inertial effects are neglected, the velocity of mobile dislocations v can be considered as almost constant.

During a time interval Δt , mobile screw dislocations move over a distance $\Delta x_s = v_s \Delta t$ in their slip plane, with v_s the velocity of screw dislocations. Consequently, all mobile screw dislocations present within a distance Δx_s from the surface of the band step will emerge from the surface during Δt . These dislocations occupy a volume $D\Delta x_s$ where D is the thickness of the slip band (see Figure 7). Their number is thus simply $D\rho_s^m \Delta x_s$, where ρ_s^m is the mobile screw dislocation density. In the same time, these emerging screw dislocations cause an increase in the cumulated displacement $\Delta g_s = bD\rho_s^m \Delta x_s$. Similarly, non screw mobile dislocations with density ρ_{ns}^m in the same slip band are responsible for a displacement $\Delta g_{ns} = bD\rho_{ns}^m \Delta x_{ns}$, with $\Delta x_{ns} = v_{ns} \Delta t$. The total cumulated displacement $\Delta g = \Delta g_s + \Delta g_{ns}$ corresponds to an increase in the shear strain within the band $\Delta \gamma = \Delta g/D$. Thus $\Delta \gamma$ equals $b\Delta t(\rho_s^m v_s + \rho_{ns}^m v_{ns})$, which allows expressing the mobile dislocation density by the equation:

$$\rho_s^m v_s + \rho_{ns}^m v_{ns} = \frac{1}{bv} \frac{\Delta \gamma}{\Delta t} \quad (5).$$

On the one hand, Caillard *et al.* [36] pointed out that the velocity of screw dislocation segments is several orders of magnitude lower than non-screw segments one, even at room temperature. On the other hand, as suggested by Louchet *et al.* [37] and confirmed later by DD simulations [38], apart from stage 0, the contribution of non-screw dislocations to plastic shear is equal to that of screw dislocations. This allows to considering $\Delta g_s \approx \Delta g_{ns}$.

Also, dislocation microstructure is mostly formed of screw dislocations. The shear rate equation can thus be simplified and taken equal to:

$$\rho_m = \frac{\dot{\gamma}}{2bv_s} \quad (6).$$

with ρ_m the total mobile dislocation density. At typical values of stress, the velocity screw dislocations is in the order of 1 $\mu\text{m/s}$ [34].

The estimate of the $\dot{\gamma}_{i,j}$ value for each band j of each strain step i has been derived from the evolution of the slip $\gamma_{i,j}$ as treated and presented in Figure 12 for each of the three identified different evolution types SF, SFS/FSF and FS. The corresponding dislocation densities $\rho_{i,j}^m$ deduced from Eq. (8) are plotted for the three types in Figure 13 a,b,c together with the global mean value $\langle \rho_i^m \rangle$ and with the mean values for each type denoted $\langle \rho_{1i}^m \rangle$, $\langle \rho_{2i}^m \rangle$ and $\langle \rho_{3i}^m \rangle$. Single and double step bands are still respectively represented by thin and thick lines with dots.

The mean value $\langle \rho_i^m \rangle$ happens to remain nearly constant with a slight decrease from $1.4 \cdot 10^{12} m^{-2}$ to $1.1 \cdot 10^{12} m^{-2}$. For the SF evolution type in Figure 13a it increases from “zero” to $1.7 \cdot 10^{12} m^{-2}$ and for the FS evolution type in Figure 13c it decreases from $9 \cdot 10^{12} m^{-2}$ to “zero”.

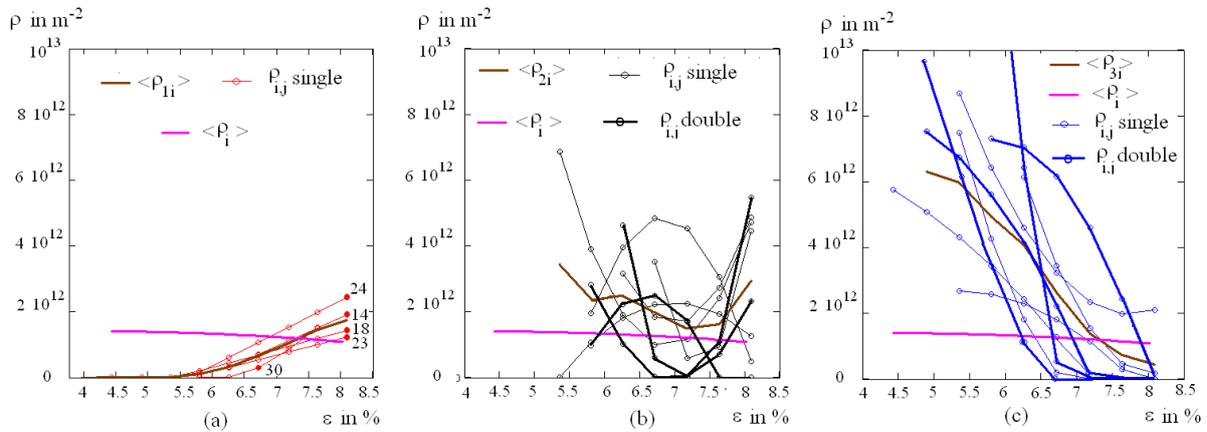


Figure 13 : Types of evolution with strain of the mobile dislocation densities for each slip band (a) Increasing for SF bands ; (b) Oscillating for SFS-FSF bands ; (c) Decreasing for FS bands

For band types SFS/FSF (Figure 13b), dislocation densities oscillate remaining close to $\langle \rho_i^m \rangle$.

Clearly, the slip bands which exhibit three different types of activity correspond with three different types of mobile dislocation density evolutions: The three slip evolution types (SF, SFS/FSF and FS) are related to a null, a mean or a large value of initial dislocation density.

To resume, slip heterogeneity analysis reported in this section provides quantitative results about their nature and their evolution:

- The plastic strain is performed by activating slip bands which width stays nearly constant;
- The slip heterogeneity from band to another is compensated by the bands spatial distribution heterogeneity;
- The double steps plastic activity is superior to the single steps activity;

- Three slip evolution types with strain are observed, i) inferior to average and slowly increasing (SF), ii) fluctuating near the average (SFS/FSF), iii) superior to average and fast decreasing (FS);
- The double step slip shows the second or the third evolution type;
- The three slip evolution types (SF, SFS/FSF and FS) are related to a null, a mean or a large value of initial dislocation density respectively.

5. Conclusion.

The topography of room temperature (110) slip in a single crystal of alpha-iron with commercial purity was analyzed from image data collected during an in-situ tensile test in an Atomic Force Microscope. The sample was examined up to 8.5% macroscopic plastic strain on a surface area of $10^4 \mu\text{m}^2$, over 14 images stored during the loading. Qualitative insights and quantitative information concerning the plastic slip process were collected. It was shown that, using the proposed and settled method for the image analysis, the topographic measures combined with the crystallographic information enable us to calculate the local slip corresponding to individual slip steps and the local slip evolutions in the steps with the macroscopic strain. Several issues of interest result from the performed analysis. First of all, we have shown that the analyzed features of slip heterogeneity and evolution with strain can be interpreted as a direct consequence of the evolution of the mobile dislocation densities. *To the authors' knowledge, we provide in our paper the first estimates of the mobile dislocation density from experimental data.*

More globally, the results reported in this work show that the proposed method allows the characterisation of plastic slip at an intermediate scale between the atomic and the continuum scales. These results are of particular importance in validating the dislocation collective behaviour predicted by Dislocation Dynamics (DD) simulations [33]. They offer the possibility to quantitatively describe the localisation process of dislocation motion in connection with local distribution of obstacles as forest dislocations. The characteristic width of slip bands can thus be connected with the ability of screw dislocations to cross-slip and to confine dislocation motions within narrow channels of the crystal.

References

- [1] Taylor G. I., Elam C. F., 1926. Proc. R. Soc. London A112 (761), 337-361.
- [2] Taylor G. I., 1934, Z. Kristall., 89 (3/4), 375-385.
- [3] Orowan E., 1940. Proc. R. Soc. London, 52, 8-22.
- [4] Jaoul B., Gonzalez D., 1961. J. Mech. Physics Solids, 9, 16-38.
- [5] Franciosi P., 1983. Acta Metall., 31, 1331-1342.
- [6] Clement N., Caillard D., Martin J. L., 1984. Acta Metall., 32 (6), 961-975.
- [7] Veysiere P., Gregori F., 2000. Phil. Mag. letters, 81 (12), 785-801.
- [8] Man J., Obrtlík K., Blochwitz C., Polač J., 2002. Acta Mater., 50, 3767–3780
- [9] Man J., Obrtlík K., Polač J., 2003. Mat. Sci. and Eng. A351, 123-132.
- [10] Man J., Petrevec M., Obrtlík K., Polač J., 2004. Acta Mater., 52, 5551-5561.
- [11] Charrier D. S. H., Bonneville J., Coupeau C., Nahas Y., 2012. Scripta Mater., 66, 475-478.
- [12] Kahloun C., Badji R., Bacroix B., Bouabdallah M., 2010. Mat. Charact., 61 (9), 835-844.
- [13] Zucato I., Moreira M. C., Machado I. F., Giampietri Lebrão S. M., 2002. Mat. Res., 5 (3), 385-389.
- [14] Shamardin V. K., Golovanov V. N., Bulanova T. N., Povstyanko A.V., Fedoseev A. E., Ostrovsky Z. E., Goncharenko Y. D., 2002. J. Nucl. Mat. 307-311, 229-235.
- [15] Belyakov A., Kimura Y., Adachi Y., Tsuzaki K., 2004. Mat. Trans., 45 (9), 2812-2821.
- [16] Badji R., Bouabdallah M., Bacroix B., Kahloun C., Belkassa B., Maza H., 2008. Mat. Charact., 59, 447-453.
- [17] Yoo M., Hiraoka Y., Choi J., 1995. Scripta Metall. et Mater., 33, 1461-1467.
- [18] Hahner P., Zaiser M., 1997. Acta Mater., 45 (3), 1067-1075.
- [19] Magid K. R., Florando J. N., Lassila D. H., LeBlanc M. M., Tamura N., Morris J. W., 2009. Phil. Mag., 89 (1), 77-107.
- [20] Perrin C., Berbenni S., Vehoff H., Berveiller M., 2010. Acta Mater., 58 (14), 4639-4649.
- [21] Hsiung L., 2010. Mater Sci. Eng. A 528, 329-337.
- [22] Collard C., Favier V., Berbenni S., Berveiller M., 2010. Int. J. Plasticity, 26 (2), 310-328.
- [23] Takeuchi T., 1969. J. Phys. Soc. Japan, 26, 354-362.
- [24] Kocks U.F., Franciosi P., Kawai M., 1991. Text. and Microst., 14-18, 1103-1114.
- [25] Zhang Y. W., Wang T. C., Liang, N. G., 1994. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 2, 1171-1193.
- [26] Mecif A., Bacroix B., Franciosi P., 1997. Acta Mater., 45 (1), 371-381.
- [27] Brenner R., Castelnau O., Badea L., 2004. Proc. R. Soc. London, A 460 , 3589-3612.
- [28] Franciosi P., Berbenni S., 2007. J. Mech. Phys. Solids, 55 (11), 2265-2299.
- [29] Chang J., Cai W., Bulatov V., Yip S., 2001. Mater. Sci. Eng. A 309-310, 160-163.

- [30] Devincre B., Hoc T., Kubin L., 2008. *Science*, 320, 5884, 1745-1748.
- [31] Domain C., Monnet G., *Phys. Rev. Letters*, 95 (2005) 215506/1-4
- [32] Monnet G., Terentyev D., 2009. *Acta Mater.*, 57 (5), 1416-1426.
- [33] Queyreau S., Monnet G., Devincre B., 2009. *Int. J. Plasticity*, 25 (2), 361-377.
- [34] Pitas I., Venetsanopoulos A. N., 1990., “digital non linear filter”, Kluwer Academic Press.
- [35] Danielson P. E., 1980. *Comp. Graph. Image Proc.*, 14, 227-248.
- [36] Caillard D., 2010. *Acta Mater.*, 58, 3493-3503.
- [37] Louchet F., Kubin L. P., Vesely D., 1979. *Phil. Mag.*, A 39, 433-454.
- [38] Tang M., Devincre B., Kubin L., 1999. *Model Simul. Mater. Sci. Eng.*, 7, 893-908.

Appendix. Examples of mean step profile evolutions.

Examples of mean step profile evolutions for single and double steps are reported in Figure A.

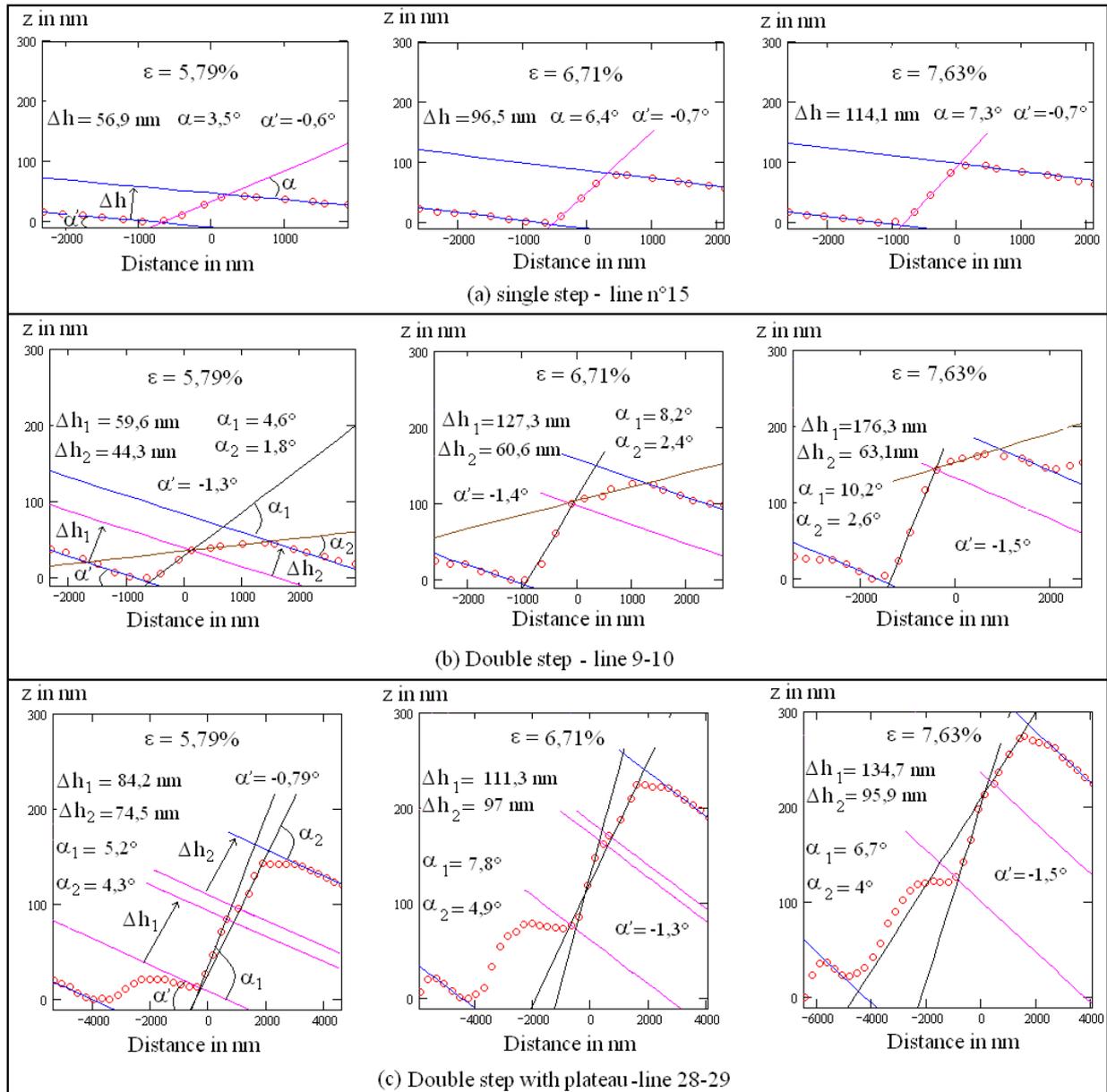


Figure A: mean step profiles from images n°9-11-13. (a) line 15 single step; (b) and (c) lines 9-10 and lines 28-29 double steps.

CHAPITRE VI – ANALYSE PAR DYNAMIQUE DES DISLOCATIONS DU ROLE DES PRECIPITES SUR LA CSSION CRITIQUE

La quantité des obstacles dans le Fer alpha à partir des images MET de D. Caillard nous donne une valeur $N_p \approx 0.5E12 \text{ m}^{-2}$, le diamètre moyen est entre $D \approx 30nm \rightarrow 50nm$.

Les quelques simulations réalisées en DD ont d'abord eu comme motivation de déterminer le type de superposition auquel obéissaient les contraintes dues à des précipités aléatoirement distribués spatialement et dispersés en taille. Le lien avec le corps du travail est très ténu puisque nous nous sommes uniquement servis de la loi obtenue pour la cission critique de traverser des précipités par une dislocation à une estimation de cette cission critique pour nos monocristaux de fer alpha.

Le code DD micromegas a donc été utilisé dans une configuration de glissement simple, pour évaluer l'interaction d'une dislocation progressant dans une densité de précipités. Le principe de la simulation est d'abord résumé, puis sont succesivement présentés les problèmes de l'interaction d'une dislocation avec une rangée périodique de précipités identiques, puis avec une distribution aléatoires de précipités de taille unique et enfin avec une distribution aléatoire de précipités de deux tailles différentes.

Les informations recueillies pour nos essais sont discutées dans la section finale.

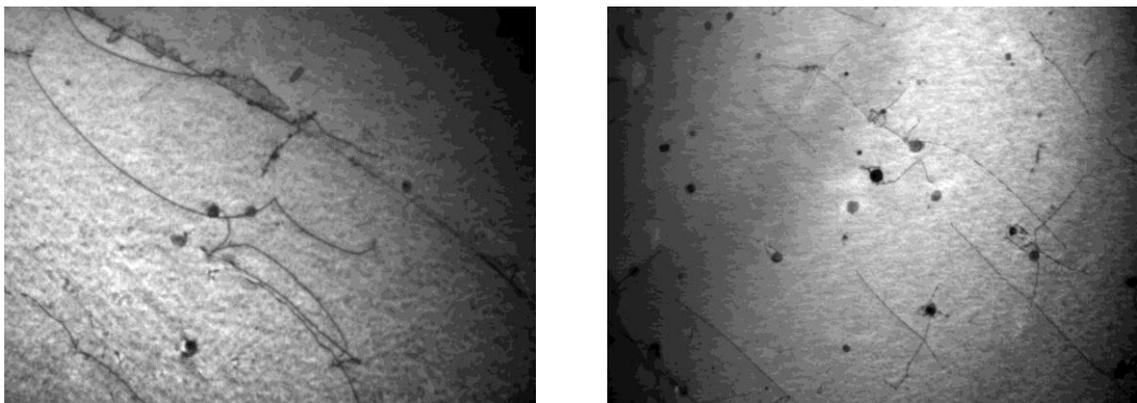


Figure VI.1: Images MET des carbures dans les monocristaux de fer alpha utilisés, taille de chaque image est de $6\mu\text{m}$ - $8\mu\text{m}$ (par courtoisie de D. Caillard, Toulouse)

VI.1. Principe des simulations DD.

La présence d'une dislocation dans un cristal conduit à l'augmentation significative de son énergie de Gibbs. Les dislocations sont, par conséquent, thermodynamiquement instables (hors d'équilibre) quelle que soit la température. La difficulté fondamentale dans la prédiction du comportement d'une dislocation réside dans le fait que l'énergie même d'un segment de longueur infinitésimale n'est pas une grandeur intrinsèque ni conservatrice ; elle varie en fonction de son environnement. Autrement dit, le comportement d'un segment de dislocation à un instant donné dépend du comportement des autres segments à ce même instant. Il s'agit là donc d'un système différentiel couplé typique impossible à résoudre analytiquement sauf dans les cas d'extrême simplicité. L'approche énergétique, appelée modèle de tension de ligne, est, par conséquent, limitée et ne s'applique qu'aux cas où l'interaction entre segments de dislocations reste négligeable ou constante. L'idée originale, à la base des simulations DD, est de recourir aux formules connues de champs de contraintes engendrés par des segments infinitésimaux de dislocations. Il suffit donc de discrétiser les lignes de dislocations en un grand nombre de segments pour connaître la force effective locale en n'importe quel point de la dislocation. Ensuite, si une loi de mobilité est connue pour le matériau, c'est-à-dire la relation entre la vitesse du segment et la force effective locale, il est possible de prédire le déplacement du segment dans le pas de temps relatif à une itération de simulations. L'exigence fondamentale à respecter dans ce type de simulations est d'assurer que le pas de temps est suffisamment petit pour ne pas s'écarter irréversiblement de l'équilibre local quasi-statique. Bien évidemment, le processus de discrétisation constitue un aspect clé des simulations DD.

Tous les codes de simulations DD sont basés sur le principe décrit ci-dessus (avec une grande variance concernant le processus de discrétisation). Mais, l'approche « force » utilisée dans la DD ne permet pas de rendre compte des réactions entraînant une modification de la structure du coeur comme les jonctions ou l'annihilation. Afin de reproduire les microstructures expérimentales, il faut donc introduire des règles locales imposant le comportement particulier relatif à chaque type de réaction. Ainsi, avec le niveau actuel de maturité du code, tous les mécanismes de la plasticité cristalline peuvent être explorés et analysés quantitativement sans aucune variable ajustée.

Fonctionnement du code.

Avant de démarrer les simulations, il faut définir une configuration initiale de segments. Le plus souvent, il s'agit d'une distribution aléatoire de sources de Frank-Read sur tous les systèmes de glissement. Cette configuration est déterminée en fonction de l'application souhaitée et générée par une procédure indépendante. Au lancement du code microMegas (mM), deux blocs principaux sont exécutés.

Bloc d'initiation

Il s'agit de l'ensemble de procédures dédiées à la lecture des fichiers de données, à la tabulation des principales propriétés topologiques ainsi que les règles locales d'interaction. Le comportement du code est entièrement déterminé par les valeurs numériques assignées aux variables globales dans cette partie. Les étapes importantes de ce bloc sont :

- Charger la Base de Vecteurs de Discrétisation (BVD) en fonction de la structure cristallographique considérée (par exemple structure Cubique simple, ou centrée ou faces centrées etc). Il s'agit d'un ensemble de vecteurs entiers 3D représentant les directions de discrétisation permises pour tous les systèmes de glissement. Dans la version ancienne du code (version Coin-Vis), deux vecteurs étaient considérés par système : un parallèle au vecteur de Burgers et un orthogonal (direction coin). Il est impossible de décrire proprement les processus de formation ou destruction de jonctions, car les directions des jonctions ne sont pas explicitement présentes dans la BVD. En effet, ces directions ne correspondent pas forcément aux directions coin et vis. Les versions actuelles du code mM intègrent explicitement les directions d'intersection des plans de glissement, assurant ainsi un traitement transparent des jonctions. L'influence du nombre de vecteurs de discrétisation est également visible sur la prise en compte de la vraie courbure de la dislocation.
- Optimiser l'unité de longueur de l'espace de simulation, A , en fonction de la longueur de discrétisation imposée. L'avantage principal de la DD discrète (DDD) est de pouvoir manipuler des variables entières, comme la position des segments, leurs longueurs et leurs déplacements. Le lien avec l'espace physique est assuré par cette unité : les valeurs entières du code sont en réalité des multiples de A .
- Sélectionner les conditions aux limites, éventuellement établir des Conditions Périodiques aux Limites (CPL). Il s'agit d'un aspect important et délicat des simulations. Si les CPL ne sont pas appliquées, les surfaces de la boîte de simulation peuvent être considérées comme des surfaces hermétiques ou libres. Dans le dernier cas, il faut associer les forces images appliquées aux dislocations. Dans ce cas, le volume dans lequel les dislocations ont un comportement volumique se réduit sensiblement par rapport à la taille de la boîte ($\approx 10\mu m^3$). Opter pour les surfaces libres conduit donc à restreindre l'utilisation de la DD à l'exploration des phénomènes locaux de la plasticité (interactions individuelles, etc.). En revanche, une introduction judicieuse des CPL plonge la boîte de simulation dans un milieu élastique infini représentatif d'un monocristal.

Boucle principale

Une fois les variables et tableaux globaux renseignés, le code entre dans la boucle principale sur le temps. A chaque itération, les différentes étapes suivantes sont exécutées :

- En fonction du chargement (vitesse ou contrainte imposée, fatigue, relaxation, etc), la contrainte est incrémentée et le tenseur de la contrainte appliquée est mis à jour.

- Les règles topologiques sont vérifiées pour tous les segments. Les segments sont, par exemple, découpés en trois lorsque leurs tailles dépassent le double de la longueur de discrétisation souhaitée.
- On calcule les trois composantes de la force sur chaque segment : (i) force appliquée de Peach et Koehler ; (ii) force interne induite par les autres segments et (iii) la tension de ligne tenant compte de la courbure locale. La résultante de ces forces est appelée la force effective.
- Une loi de mobilité est utilisée pour calculer la vitesse des segments en fonction de la force effective. L'incrément de temps étant constant, nous pouvons ainsi évaluer le déplacement à réaliser par chaque segment.
- Ensuite, les segments sont explicitement déplacés avec l'amplitude prévue dans la limite de compatibilité topologique. Si, par ailleurs, un obstacle est détecté dans le « trapèze de vol », le segment est arrêté sur l'obstacle et un traitement de contact est engagé. Selon les règles locales, rendant compte des réactions de coeur des dislocations et établies dans le bloc initial, une rotule (segment de taille nulle) est introduite au point d'intersection des deux segments. Dans les itérations suivantes et en fonction du champ de forces locales, cette rotule peut se développer pour initier la réaction (jonction, annihilation) ou disparaître lorsque le bilan énergétique est défavorable. Dans ce cas les segments poursuivent leurs chemins sans réaction. A la fin de la boucle, les grandeurs mésoscopiques sont calculées : déformation plastique totale, densité de dislocations, etc. Ce sont ces grandeurs qui sont utilisées pour incrémenter la contrainte appliquée afin de respecter le mode de chargement imposé.

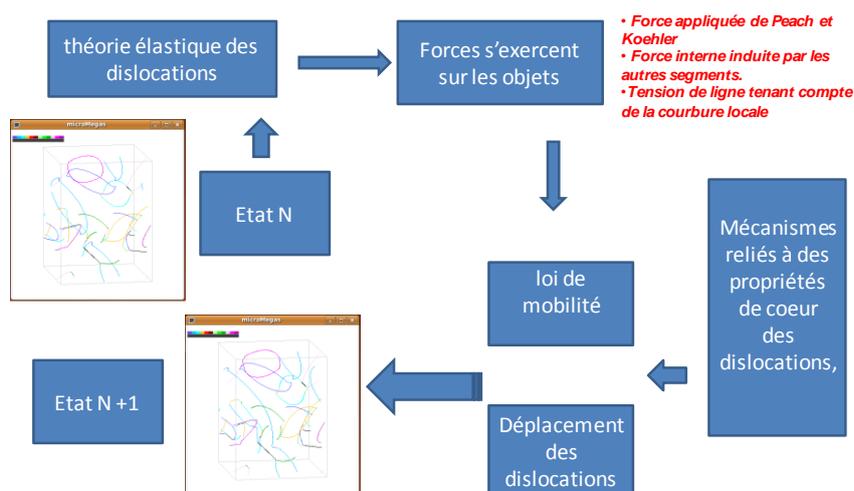


Figure IV.2. Schéma de fonctionnement du code DD

VI.2. Interaction avec une ligne périodique de précipités identiques.

Le problème de la contrainte d'écoulement résultant de l'interaction d'une dislocation avec une distribution d'obstacles impénétrables a été d'abord traité par Orowan (Orowan 1948). Considérant une dislocation s'inclinant entre une paire isolée de tels obstacles, et en utilisant une hypothèse de tension ligne constante, il a obtenu le résultat maintenant familier pour la contrainte d'écoulement d'Orowan qui peut être écrite T_{Orowan} :

$$T_{Orowan} = Gb / L \quad (VI.1)$$

où G est le module de cisaillement, b est le vecteur de Burgers et L est l'espacement entre obstacles. L'hypothèse d'une paire isolée d'obstacles ne tient pas compte des statistiques complexes qui déterminent la contrainte d'écoulement réelle nécessaire pour conduire une dislocation à travers une distribution aléatoire des obstacles sur son plan de glissement.

Ce problème a été traité en détail et nous possédons maintenant des méthodes pour traiter ces aspects statistiques (KOC 1967, FOR 1966) qui seront abordés au point suivant.

Le travail de Bacon (BAC 1973) par la suite met l'attention sur l'importance de l'approche en tension de ligne. En réalité, une dislocation n'est pas une corde élastique avec une tension de ligne bien définie, car elle interagit avec elle-même en raison de son champ de contrainte propre. Cette interaction semble être importante dans certains cas, particulièrement en ce qui concerne la contrainte d'Orowan puisque les branches de dislocation voisines peuvent subir de très fortes interactions dipolaires lorsque la dislocation s'enroule autour de l'obstacle. Il faut ajouter les interactions de dislocation avec elle-même dans le model de tension de ligne.

Bacon a fait des simulations numériques pour trouver une formule qui dépend de la taille D et de l'espacement L périodique des précipités. Le modèle de Bacon utilisé pour faire les calculs, se compose d'une rangée infinie d'obstacles impénétrables périodiques rigides circulaires ayant un diamètre D et un espacement inter-obstacle L (Figure VI.3). Cet ensemble constitue les conditions aux limites de l'approche de Bacon et al.

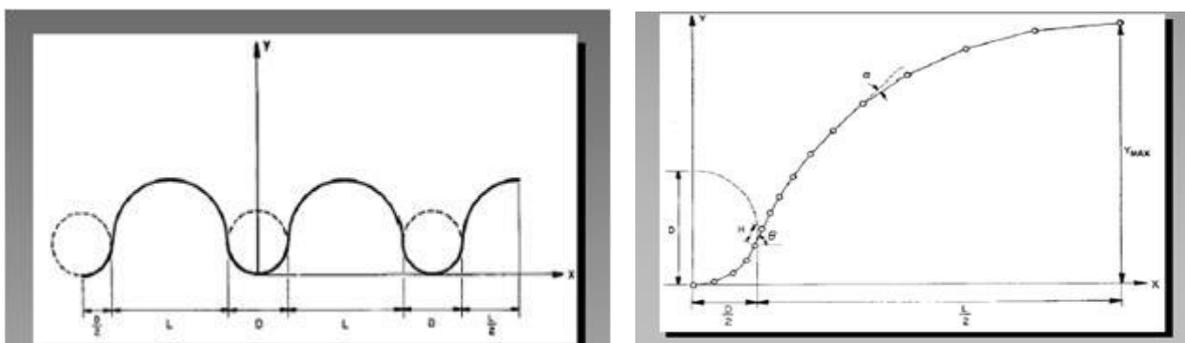


Figure VI.3 : Schéma de la configuration de dislocations utilisée par Bacon

La détermination de l'équation d'équilibre statique, étant donné les conditions aux limites ci-dessus, est plus facilement exprimée en termes de contraintes de cisaillement résolue dans le plan de glissement le long du vecteur de Burgers comme suit:

$$\sigma(s) + \tau_{self}(s) = 0 \quad (VI.2)$$

$\sigma(s)$ est la contrainte appliqué, $\tau_{self}(s)$ est la contrainte interne ou la contrainte de résistance de la dislocation et s est la position. $\tau_{self}(s)$ en un point donné sur la ligne est calculée comme la moyenne des valeurs de $\tau_{self}(s)$ à deux points dans le plan de glissement à égale distance, et sur la normale à la ligne de dislocation au point donné. Cette distance est r_0 et on lui appelle le rayon du coeur de dislocation. Pour simplifier le calcul, toutes les longueurs sont normalisées en r_0 .

Le résultat numérique de Bacon et al. montre que la tension ligne en équilibre est de la forme:

$$Gb^2 A(\ln X + B) \quad (VI.3)$$

où A est $1/4\pi$ et $1/4\pi(1-\nu)$ pour une dislocation coin et vis, B est une constante à l'ordre de 1, X varie en fonction de D et L . Lorsque L est faible par rapport à D , nous devrions trouver $X = L$ (**FRI 1964**). Lorsque D est faible par rapport à L , d'autre part, les segments de dislocation à proximité d'un obstacle devraient interagir plus fortement avec les segments de l'autre côté (l'autre branche) de l'obstacle, et il semble raisonnable de supposer $X = D$. La plus simple moyenne de D et L qui donne le bon comportement est une moyenne harmonique :

$$X = \bar{D} = (D^{-1} + L^{-1})^{-1} \quad (VI.4)$$

Et sur cette base la contrainte d'Orowan prend la forme :

$$\tau_{Periodique} = (Gb / L) A(\ln \bar{D} + B) = T_{Orowan} A(\ln \bar{D} + B) \quad (VI.5)$$

On a trouvé $B=0.7$ et $r_0 = b/2$. (le choix de r_0 est vérifié par simulation DM). La différence entre les deux lois est montrée sur la **figure VI.4**.

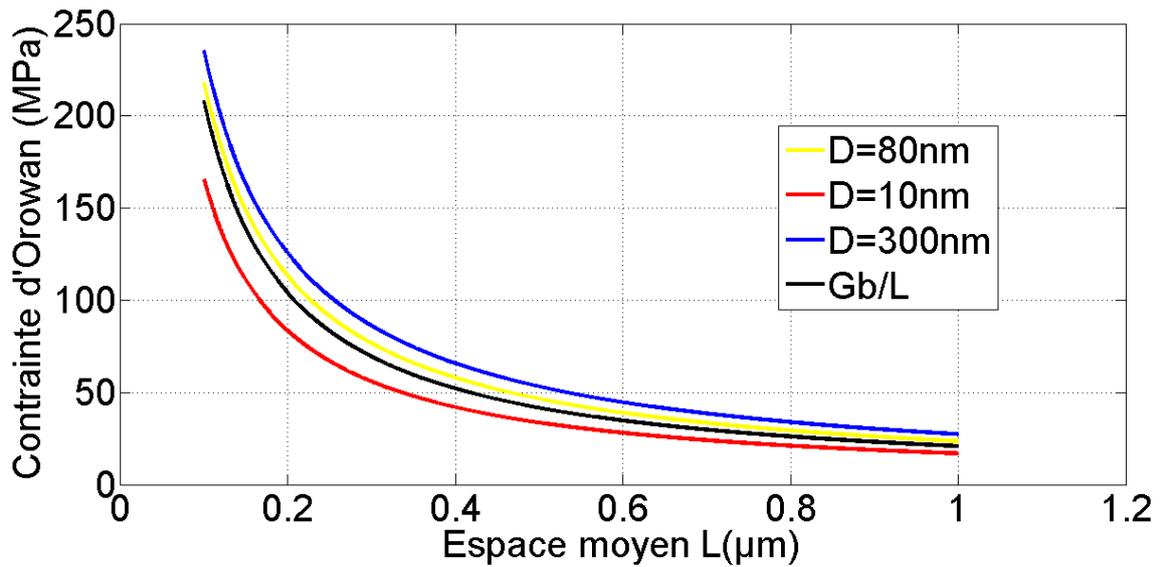


Figure VI.4: Comparaison de la loi d'Orowan avec la loi modifiée par Bacon d'une dislocation coin avec 3 valeurs différentes de D .

La **figure VI.5** montre les résultats de simulation DD comparés aux lois précédentes : Les résultats montrent dans le cas des obstacles périodiques que la contrainte d'Orowan modifiée par Bacon donne une bonne approche.

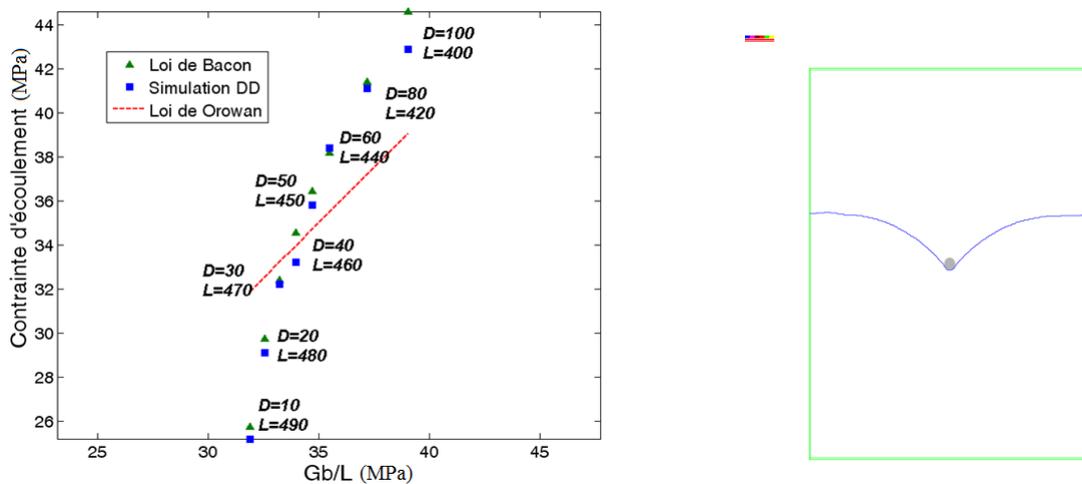


Figure VI.5 : Comparaison de la loi d'Orowan avec la loi modifiée par Bacon d'une dislocation coin avec la simulation DD.

VI.3. Interaction avec une distribution aléatoire de précipités identiques

La contrainte d'écoulement macroscopique pour un réseau aléatoire d'obstacles impénétrables peut être déduite d'une manière directe. Cela revient à évaluer le facteur de bonne statistique à appliquer à notre valeur de la contrainte calculée d'Orowan.

En utilisant le résultat de Foreman et Makin (**FOR 1966**), et la théorie statistique de Kocks (**KOC 1967**), on a :

$$\tau_{random} = \left(\cos \frac{\phi}{2}\right)^{1/2} \tau_{Périodique} \quad \text{soit} \quad \tau_{random} = \left(\frac{\ln \bar{D} + 0.7}{\ln L}\right)^{3/2} \frac{Gb \ln L}{L 2\pi} \quad (\text{VI.6})$$

Le travail de simulation dans ce cas a été de vérifier la loi aléatoire pour une famille de précipités (D, L). On propage une ligne de dislocation dans une boîte de plusieurs centaines de précipités (**Figure VI.4**). La contrainte de durcissement d'Orowan est la contrainte nécessaire pour que la dislocation puisse traverser la boîte. On a ici quelques résultats pour différentes valeurs de D et L.

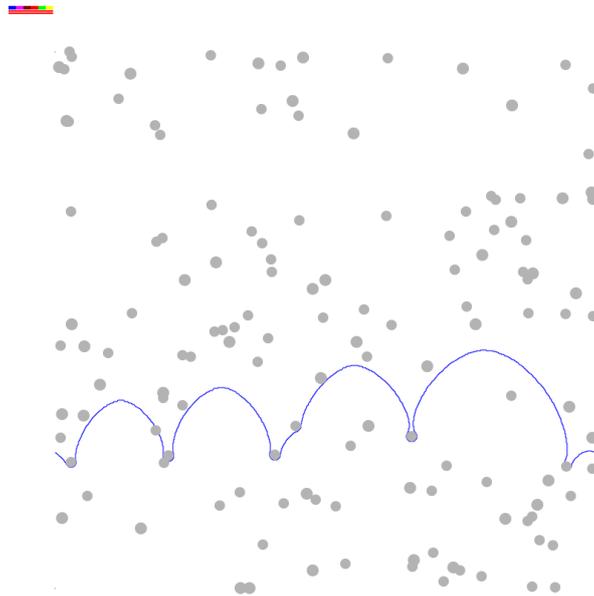


Figure VI.6 : Traversée d'une population aléatoire de précipités par une dislocation coin

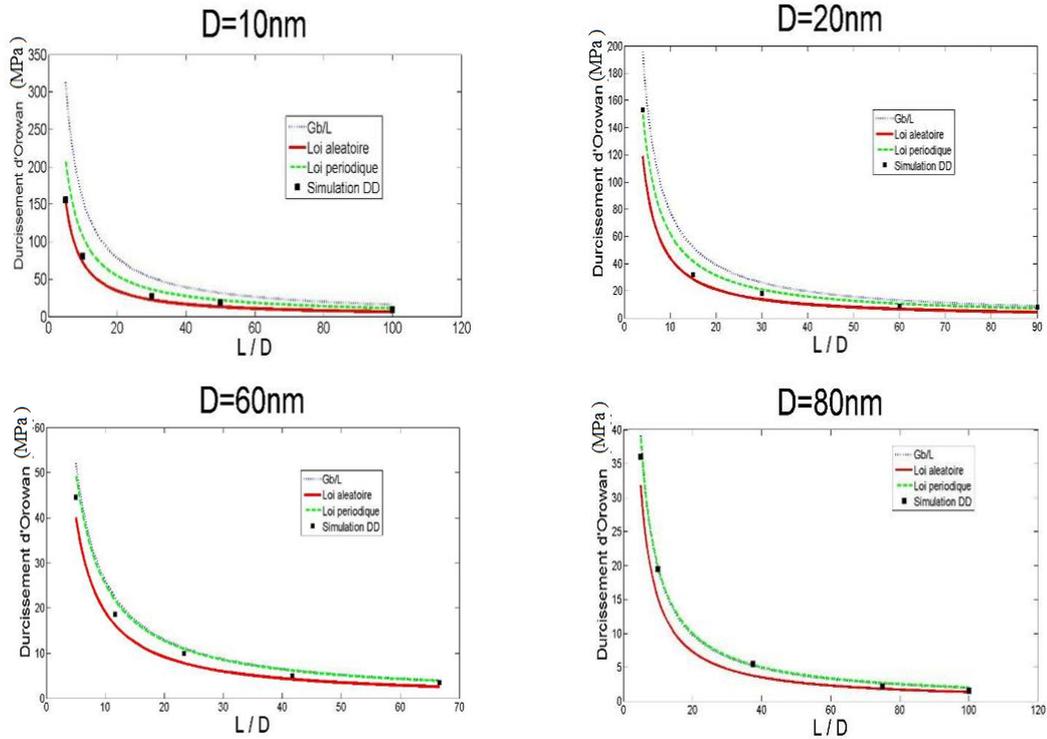


Figure VI.7 : Test de la loi aléatoire de Bacon par simulation DD avec plusieurs valeurs de D

La loi de Bacon donne de bons résultats dans tous les cas de distribution périodique comme aléatoire mais pour L assez grand (par rapport à D) on peut utiliser la loi d'Orowan en approximation.

VI.4. Interaction avec une distribution aléatoire de précipités de deux types différents.

En général, l'irradiation conduit à la formation d'une large variété de défauts cristallins (ponctuels, boucles de dislocations, précipités, tétraèdres de faute d'empilement, cavités, etc.) ancrant fortement les dislocations. Il faut donc étudier le cas de plusieurs familles présentes simultanément. Dans le cas de plusieurs familles de précipités, qui est le plus immédiat à traiter, Nembach (NEM 1996) propose des lois de mélange du type:

$$\tau = (\tau_1^n + \tau_2^n)^{1/n} \quad (\text{VI.7})$$

avec $n=1$: loi linéaire, $n=2$: loi quadratique, etc.

On rappelle que $L = 1/\sqrt{CD} - D \approx 1/\sqrt{CD}$ C est la concentration. Il vient alors :

$$\tau \sim \frac{1}{L} \sim \sqrt{CD} \quad (\text{VI.8})$$

Dans le cas des précipités de tailles voisines on a : $D_1 \approx D_2 = D$ et $C^{total} = C_1 + C_2$ donc

$$\tau \sim \sqrt{C^{total} D} = \sqrt{(C_1 + C_2)D} \sim \sqrt{\tau_1^2 + \tau_2^2} \quad (VI.9)$$

Pour la première estimation, on trouve que la loi quadratique est plus raisonnable que la loi linéaire. Par contre, on a ici des difficultés : comme $\tau \sim \sqrt{CD}$ donc si $\tau_1/\tau_2 \geq 10$ et $D_1 \approx D_2$ alors $C_1 \approx 100C_2$ ça veut dire que si le nombre des précipités de famille 2 est de plusieurs centaines, alors le nombre des précipités de famille 1 est plusieurs de dizaines milles. Le nombre de calculs dans la simulation sera très grand, et le calcul entier de simulation alors prend au moins un mois pour donner le résultat.

Mais les analyses dans ce cas là n'est pas nécessaire, parce que si $\tau_1/\tau_2 \geq 10$ donc

$$\tau = (\tau_1^n + \tau_2^n)^{1/n} \approx \tau_1 \quad (VI.10)$$

pour les deux lois.

Donc notre travail s'est limité au cas où τ_1 est comparable à τ_2 et $C_1 \leq 100C_2$ ou $L_2 \leq 10L_1$

D'abord, on a considéré le cas particulier où $D_1 = D_2$ et $L_1 = L_2$:

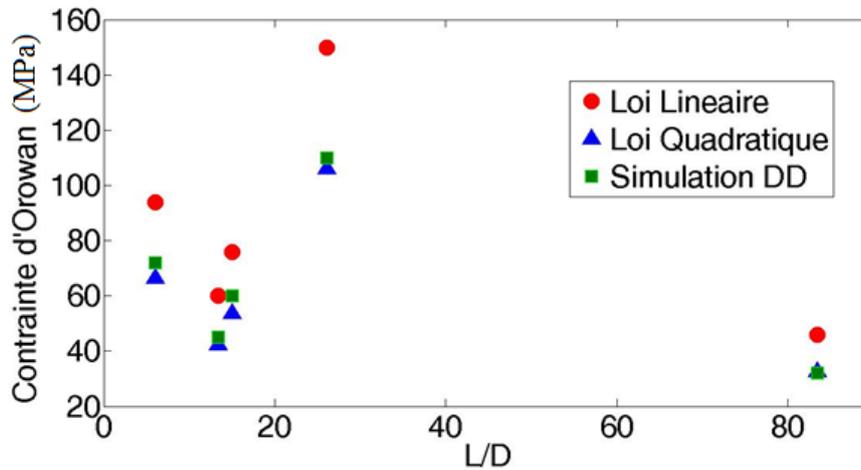


Figure VI.8 : Vérification de la loi de mélange par la simulation DD

On voit sur la **figure VI.8** que la loi quadratique est en bon accord avec les simulations DD dans tous les cas ici : Les points verts sont proches des points bleus.

On a ensuite étudié le cas où $D_1 \neq D_2$ et $L_1 \neq L_2$. Les résultats sont présentés **figure VI.9** de différentes manières en fonctions des paramètres D_2/D_1 et L_2/L_1 .

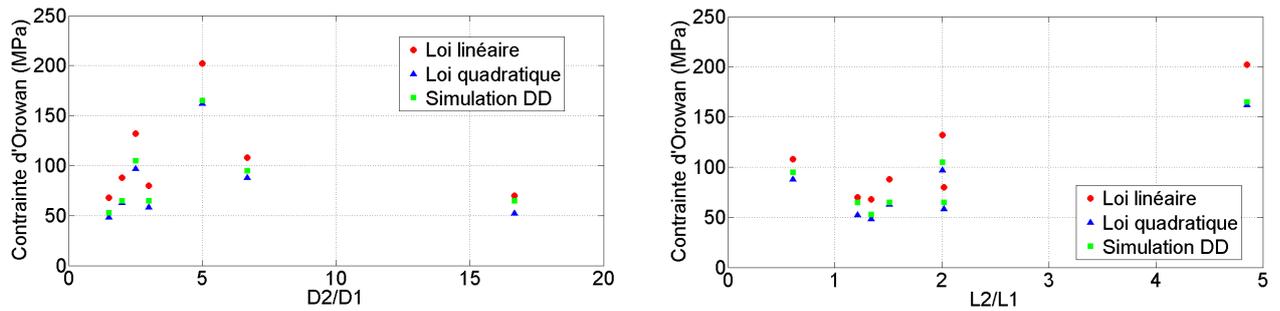


Figure VI.9 : Vérification de la loi de mélange par la simulation DD

Le résultat montre que la loi quadratique s'avère correcte dans plusieurs cas (les points verts sont proches des points bleus).

Si on regarde les valeurs de n en rapport de D_1/D_2 , L_1/L_2 et τ_1/τ_2 on trouve que dans plusieurs cas où D_1/D_2 est de l'ordre de L_1/L_2 c'est la loi quadratique $n=2$ qui semble le mieux convenir. Mais les deux tests avec $n=1.2$ et $n=1.4$ montrent que la différence n'est pas trop grande. Ces faibles écarts conduisent à rechercher la meilleure constante n globalement.

D_1/D_2	0.4	16.7	0.2	6.7	3.3	0.5	0.3	0.6	1
L_1/L_2	0.5	1.2	0.3	0.6	0.3	0.6	0.5	0.7	1
τ_1/τ_2	1.8	2	3.3	3.7	6.6	1.5	1.8	1.2	1
n	1.6	1.2	1.7	1.4	2	2	1.8	1.8	1.9

Tableau IV.1 : Les valeurs de n par simulation DD

Après avoir ajusté les résultats de DD avec l'exposant n dans la loi de superposition (Eq. VI.10), on constate finalement que la valeur $n=2$ est plutôt convenable. Cette comparaison conduit finalement à la loi de mélange pour deux familles d'obstacles :

$$\tau = (\tau_1^2 + \tau_2^2)^{1/2} \quad (\text{VI.11})$$

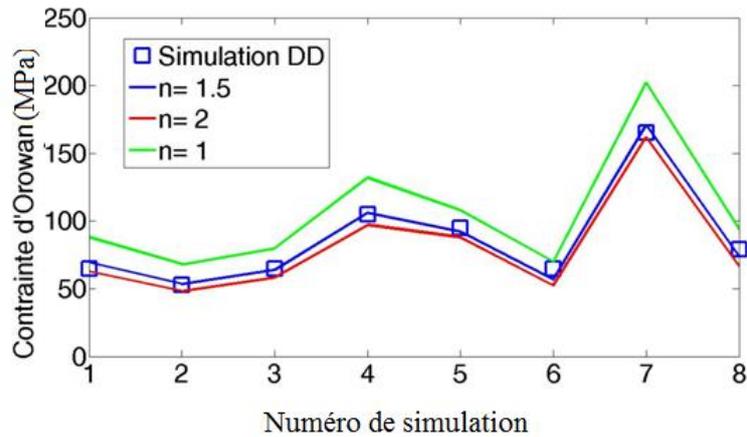


Figure VI.10 : Vérification de la loi de mélange avec différentes valeurs de n

VI.5. Cas du carbure dans la ferrite, discussion.

La géométrie des obstacles rencontrés par la dislocation, comme représentée par la taille d'obstacles D et l'espacement moyen L , a une influence considérable sur la contrainte d'Orowan. Le franchissement d'un obstacle par une dislocation peut être considéré se produire à la contrainte nécessaire pour le contournement de l'obstacle par les dipôles de dislocation qui s'allongent de chaque côté durant le mouvement.

Les interactions ont une influence profonde et inattendue de la forme de boucles de dislocation s'inclinant. Par les simulations réalisées, nous avons la formule approximative de la contrainte d'écoulement d'une dislocation en déplacement à travers un réseau aléatoire d'obstacles impénétrables constitué d'une ou de deux familles de précipités.

On revient pour terminer sur les images de la **figure VI.1** dont les tailles sont de $6 \times 8 \mu\text{m}^2$. Pour une image MET, l'épaisseur d'une lame mince doit être plus petite que 100nm – cette valeur est cohérente avec la densité de dislocations mesurée. La taille des obstacles est estimée entre 10nm jusqu'à 160nm , ce qui donne la taille moyenne $D=30\text{-}50\text{nm}$. On en déduit une concentration moyenne des obstacles de l'ordre de $C = 2.10^{19} \text{m}^{-2}$, correspondant à un libre parcours moyen $L=50D$.

En appliquant l'**eq. VI.6** (avec $G=84\text{GPa}$), on obtient la contrainte de durcissement par les précipités pour les dislocations respectivement de $\tau = 5\text{MPa}$. On a utilisé la valeur de 5MPa pour faire le calcul dans notre modèle.

VI.6. Références bibliographiques du chapitre VI.

- [ASH 1969]: ASHBY, M. F.. 1969. Physics of Strength and Plasticity (M.I.T. Press), p.113; 1970, Phil. Mag., 21,399.
- [BAC 1967] : BACON. D.J., 1967. Phys. Stat., Sol.,23, 527.
- [BRO 1965]: BROWN, L.M., 1965. Phil. Mag., 10, 441 ; 1967, Jbid., 15, 363.
- [DEC 1965]: DECHATEL. P., and KOVACS. I., 1965, Phys., Stat. Sol.. 10, 213
- [DOM 2005] : Domain C., Monnet G., 2005. “*Simulation of screw dislocation motion in iron by molecular dynamics simulations*”, Physical Review Letters, V95, n° 21 , 215506.
- [FOR 1966]: FOREMAN, A.J.E and MAKIN.M.J, 1966, Phil., Mag., 13, 911
- [FOR 1970]: FOREMAN, A.J.E., HIRSCH, P.B., and HUMPHREYS, F.J., 1970, Fundamental Aspects of Dislocation Theory, Vol. 2 (N.B.S. Pub. No. 317), p.1083.
- [FRI 1964]: FRIEDEL. J., 1964. Dislocation (Pergamon), p.31
- [KOC 1967]: KOCKS, U.F., 1967. Can. J. Phys., 45, 737.
- [NEM 1996]: E. Nembach, dans “Particle strengthening of metals and alloys”, New York, Wiley (1996).
- [ORO 1948]: OROWAN, E., 1948, Symposium on Internal Stresses in Metals and Alloys (London: The Institute of Metals), p. 451.
- [PEA 1950]: PEACH, M., and KOEHLER.J.S., 1950. Phys, Rev., 80, 436.
- [QUE 2008] : Thèse présentée par Sylvain QUEYREAU pour obtenir le grade de DOCTEUR de l’UNIVERSITE PIERRE et MARIE CURIE spécialisée Physique et Chimie des Matériaux : *Etude des mécanismes d’érouissage sous irradiation de la ferrite par simulations de dynamique de dislocations*. Paris 2008, Pages 5-34.

CONCLUSION GENERALE

Dans ce travail de thèse essentiellement expérimental sur le fer alpha de pureté commerciale, je me suis efforcé de faire apparaître quelques caractéristiques essentielles du comportement plastique intracristallin concernant, au-delà du fer alpha, les monocristaux de structure cubique centrée en général. Bien que les études en laboratoire de la plasticité de la ferrite et des monocristaux CC aient été nombreuses depuis le début du 20^{ème} siècle et vraisemblablement depuis avant encore, ce comportement reste encore à ce jour source de questionnements nombreux et de désaccords marqués entre spécialistes. C'est aux travaux de simulations par dynamique moléculaire et par dynamique des dislocations de ces vingt dernières années que l'on doit d'avoir notablement progressé dans la compréhension des mécanismes élémentaires, bien plus complexes que dans le cas des métaux CFC, sans que pour autant des confrontations décisives à l'expérience aient été menées suite à ces calculs ni qu'une modélisation explique l'ensemble des observations de manière satisfaisante.

Ce fut la motivation de la campagne d'essais menée dans ce travail de contribuer à cette confrontation, campagne qui s'est efforcée de mobiliser les moyens avancés actuels de caractérisation microstructurale, en microscopie électronique à balayage et en microscopie à force atomique notamment.

La démarche suivie pour la réalisation d'essais in situ sur ces deux types d'équipements visait globalement, en s'appuyant sur les observations anciennes et les simulations récentes disponibles, d'une part à identifier au mieux les systèmes de glissement participant à la déformation et d'autre part à préciser leurs seuils d'activation, les taux d'écrouissage associés à chacun et les modules d'interactions entre systèmes, à même d'être confrontés à des simulations disponibles ou à venir.

Le travail expérimental a porté sur des monocristaux élaborés au LSPM. Si l'obtention de monocristaux de taille approprié pour les essais de tractions in-situ a été relativement aisée, des monocristaux suffisamment massifs pour des essais de compression in situ furent beaucoup plus difficiles à obtenir selon les orientations sélectionnées. Une originalité de ce travail est d'avoir pu tester les principales orientations d'intérêt en traction et en compression.

Au plan qualitatif de l'identification des systèmes de glissement, par analyse des traces de glissement et le suivi des rotations cristallines (technique EBSD), l'association d'essais de traction et de compression selon une grande diversité d'orientation cristalline a permis de conclure sans ambiguïté à la participation des deux familles de plans de glissement (110) et (112) à la déformation. Sans ambiguïté également l'asymétrie du glissement sur les plans de type (112) a été confirmée.

Au plan plus quantitatif, la grande difficulté à faire apparaître des résultats plus précis que de grandes tendances pour ce qui concerne les cissions critiques d'activation des différents types de glissement et les modules d'écrouissage associés à ces différents glissement, a conduit à examiner

de plus près les causes potentielles de cette difficulté. Une large part de l'abondante littérature faisant d'état de non respect de la loi de Schmid, d'écarts ou de violations de celle-ci pour les cristaux CC, a été examinée. Cela a permis de mettre en évidence qu'en comparaison à la simplicité de comportement des cristaux CFC, tel le cuivre pris en référence dans ce travail, la loi de Schmid pouvait très bien montrer une plus grande variabilité pour les cristaux CC sans constituer pour autant une mise en cause de celle-ci dans son fondement d'un seuil d'activation du glissement cristallographique défini par le franchissement d'une forêt de dislocations.

Deux raisons à cette variabilité ont été pointées, toutes les deux en relation à l'implication de systèmes non symétriques de glissement : d'une part cette non symétrie rend la réponse plastique extrêmement sensible à l'orientation de la sollicitation et à son signe, d'autre part le grand nombre de plans de glissement en zone de chaque direction induit une forte influence du glissement dévié, influence elle aussi asymétrique sur les plans (112). Il est depuis longtemps tenu compte du fait que le triangle de référence type des cristaux de structure cubique centrée est subdivisé en trois secteurs aux frontières variables avec les seuils relatifs d'activation des différents plans (110) et (112). Il ne semble en revanche pas avoir été remarqué, ou du moins il n'est pas tenu compte, que chacun de ces secteurs s'avère lui-même plus ou moins subdivisé en zones dans lesquels l'ensemble des plans (112) sollicités en sens facile ou difficile est différent, induisant des contributions différentes du glissement dévié dont la DD a montré le rôle majeur dès le seuil mesuré de plasticité dans les cristaux Cubiques Centrés.

Il a par ailleurs été montré que la dissociation non planaire des dislocations dans cette structure CC, tout comme la forte participation du glissement dévié dans le processus de leur mouvement, si elle rendait improbable un critère d'activation du glissement sans aucune interdépendance entre les plans de zone d'une même direction de glissement, elle ne nécessitait pas pour autant qu'il faille prendre en compte les effets très locaux des autres contraintes que les cisssions dans le plan et selon la direction de glissement dans le critère de plasticité. L'utilisation d'une forme partiellement régularisée de la loi de Schmid, associant les systèmes de glissement par groupes en zone de chacune des directions de glissement, était tout à fait en mesure de traduire ces principaux couplages et un tel fonctionnement collaboratif des plans de zone pour la mobilité des dislocations. Les principales caractéristiques observées du glissement dans les cristaux CC ont pu ainsi être qualitativement reproduites.

Cette étude a fait l'objet d'un article à paraître dans Philosophical Magazine.

Les observations en AFM, possibles par essais de traction uniquement, ont également apporté des informations qualitatives et quantitatives sur les mécanismes fins du glissement.

Plusieurs séries d'images ont été examinées avec l'objectif d'apprécier la planéité des glissements (110) et (112), en sens facile et en sens difficile, en comparaison au glissement plan dans les cristaux CFC et notamment dans des cristaux de cuivre pris en référence.

Qualitativement le glissement dans les plans (110) de la ferrite a été observé de planéité tout à fait comparable à celle du cuivre, le glissement dans les plans (112) s'avérant davantage accompagné de déviations, et celles-ci apparaissant en général plus marquées lors de l'activation d'un plan (112) dans son sens facile que dans son sens difficile. Ces observations ont donc confirmé la forte présence de glissement dévié, inhérente à la structure des dislocations et à la multiplicité des plans de zone en capacité de participer à leur mouvement. Rien n'indique jamais la présence d'autres plans que ceux des familles (110) et (112).

Une analyse plus quantitative a été menée en collaboration avec C. Kahloun pour extraire des images AFM les paramètres topologiques nécessaires à l'estimation locale du glissement et donc à ses caractéristiques d'hétérogénéité en comparaison au glissement macroscopique, ainsi qu'aux évolutions de ces hétérogénéités à mesure que la déformation plastique augmente.

Cette étude, menée pour une situation de glissement (110) a montré en premier lieu la faisabilité de la démarche qui se poursuit actuellement au LSPM sur une version upgradée de l'AFM de quasiment un ordre de grandeur en résolution. L'étude a également abouti à plusieurs résultats quantitatifs sur le processus de l'émergence des glissements en surface d'un cristal, très hétérogène d'emblée, avec une phase de multiplication des marches suivie, quand leur nombre se stabilise, d'une phase d'intensification du glissement dans les marches sans étalement de la largeur de celles-ci. Ces informations sont du type requis dans certains modèles hétérogènes de plasticité intracristalline où apparaissent parmi les paramètres caractéristiques, le nombre de bandes de glissement dans le grain et l'intensité du glissement par bande. Mais l'analyse topologique du glissement s'est avérée assez fine pour apporter également des informations quantitatives sur les densités de dislocations mobiles assurant le glissement sur ces bandes. Aux différents stades d'évolution des marches de glissement (vision 3D des bandes) correspondent différents stades d'évolution de cette densité de dislocations mobiles qu'il est donc ainsi possible de quantifier.

Ces travaux ont également fait l'objet d'un article à paraître dans *Acta Materialia*.

Une étude comparative avec le cuivre monocristallin est en cours et plusieurs autres développements sont en perspectives grâce à la faisabilité établie.

En dernière partie de ce travail de thèse, le corps principal du travail expérimental mené a fait l'objet d'une confrontation avec la modélisation de la plasticité cristalline telle qu'aujourd'hui cadrée par les apports de la dynamique des dislocations. Si une large part des avancées de cette modélisation DD a été validée pour les cristaux cubiques à faces centrées, la plupart sont valides pour les cristaux

CC également, tandis que plusieurs résultats spécifiques sont déjà disponibles pour ce qui concerne les cristaux CC, notamment les coefficients d'interactions entre familles de dislocations glissant sur des plans (110). La confrontation des résultats expérimentaux obtenus aux simulations numériques a été menée sur les essais de traction les plus représentatifs, dont les conditions d'homogénéité sont en général mieux satisfaites qu'en compression.

La loi de comportement utilisée pour nos confrontations aux essais prend en compte de la manière introduite par la DD, le rôle capital du glissement dévié sur l'écoulement plastique dès le seuil de plasticité et le rôle tout autant essentiel – au travers du libre parcours moyen - de la mise en mouvement des dislocations sur plusieurs systèmes dès l'application de la sollicitation, quand bien même un seul système devient actif une fois le seuil atteint. Elle prend aussi bien sur en compte les informations les plus actuelles à propos des coefficients d'interactions entre dislocations. Ceux-ci n'étant pas encore publiés pour ce qui concerne les interactions entre dislocations sur les systèmes de plans (112) et entre paires mixtes (110) et (112) de plans, les simulations faites ont introduits quelques coefficients supplémentaires à ceux fournis par la littérature. Certains coefficients ont également été introduits pour quantifier l'aptitude au glissement dévié des différents systèmes de glissement, sous la forme d'une matrice de dimension 3x3, là où dans les monocristaux CFC un unique scalaire a été introduit.

Ces éléments introduits de manière à obtenir une bonne concordance entre simulations et essais, auront à être validés par des calculs de DD qui devraient être assez rapides à venir. Les valeurs utilisées s'avèrent réalistes en regard de la connaissance actuelle des mécanismes.

Sans revenir ici à l'ensemble des constatations rapportées suite à ces confrontations, il s'est avéré que la grande classification obtenue pour les cristaux CFC, d'interactions de type colinéaires plus fortes que les différentes interaction de type jonction, elles-mêmes plus fortes que les interactions dipolaires (glissements sur plans parallèles), avec des écarts chaque fois d'un ordre de grandeur typiquement, est resté valide pour nos essais sur le fer, les différences liées aux types de plans interagissant ne modifiant pas cette classification.

De manière plus intéressante, c'est dans les coefficients de la matrice 3x3 de glissement dévié qu'une sensibilité s'est avérée. Ceci s'explique par le fait qu'en présence de glissement le plus souvent simple, le nombre de coefficients d'interaction impliqués est faible alors que les coefficients de glissement dévié sont davantage présents en association avec le système primaire.

Un article est en préparation pour le International Journal of Plasticity, sur l'ensemble de ces résultats, présentés au symposium « Plasticity 2013 » à Nassau, Bahamas.

A coté de ces principales parties, le fait d'avoir travaillé sur des monocristaux issus de fer ARMCO commercial, non décarburé a justifié une étude de l'effet des carbures sur le seuil d'écoulement

plastique dont les valeurs mesurées sont singulièrement au-dessus des valeurs escomptées y compris pour des monocristaux comme ceux utilisés dont la densité initiale de dislocations est plutôt élevée. Les quelques essais sur machines conventionnels ont montré que ces cissions seuils élevées ne provenaient pas d'un effet de taille, et une fois pris en compte une contrainte de Peierls type, pour la ferrite à température ambiante, force était de considérer l'écart restant comme imputable aux carbures, que le Pr D. Caillard avait eu l'amabilité de mettre en évidence par quelques observations MET.

Cette question m'a donné l'opportunité d'une initiation aux calculs de DD, avec l'objectif d'examiner l'interaction dislocation – précipité pour une estimation de la part de cission à attribuer à leur présence dans les monocristaux élaborés au LSPM. La mise au point de ces simulations a conduit dans un premier temps à reproduire les grands modèles théoriques de ces interactions, avec un précipité unique, puis une rangée périodique et une population aléatoire de précipités de même taille, et enfin de précipités de deux tailles différentes aléatoirement répartis.

Il entre dans les perspectives de l'équipe où j'ai conduit mon travail de poursuivre maintenant les travaux de simulations en DD avec un code intégrant les plans de glissement (110) et (112) des cristaux CC, avec et sans carbures, pour notamment valider les coefficients introduits.

D'autres travaux expérimentaux se prolongent au LSPM sur les monocristaux CC, notamment le molybdène, pour lesquels une part des résultats obtenus sur le fer alpha peut être utilisée.

Etude par essais in situ MEB et AFM sur monocristaux des mécanismes de glissement à température ambiante de la ferrite de pureté commerciale.

RESUME

Beaucoup d'aciers sont des matériaux multiphasés, dont souvent la ferrite ou fer alpha, de structure CC cubique centrée, est un constituant important sinon le principal. C'est le cas notamment des aciers des cuves des centrales nucléaires du parc français dont EDF est le maître d'œuvre. Afin de bien comprendre comment ces aciers vont évoluer au cours de la durée de vie des installations, et de savoir le prévoir au mieux, il est important de connaître précisément les mécanismes élémentaires de la plasticité dans les diverses phases métalliques constitutives des structures. Or la plasticité des métaux CC et en particulier de la ferrite reste pour une large part insuffisamment comprise. Ce qui justifie, aux plans théorique et applicatif, les études diverses consacrées à l'amélioration de cette compréhension parmi lesquelles ce travail s'inscrit. Ce travail a bénéficié d'un soutien financier de la part de EDF R&D.

Alors que l'on sait depuis un siècle au moins que le principal glissement dans les cristaux métalliques CFC opère sur les plans denses (111) et suit les directions denses $\langle 110 \rangle$ dans une large gamme de températures et de situations, la polémique à propos des mécanismes opérant dans les cristaux CC n'est pas encore close : le glissement est-il ou non cristallographique ou bien suit-il l'orientation du plan de cisaillement maximum, observe-t-on une ou des familles de plans cristallins identifiés ou bien n'est-on en mesure que de seulement fixer les directions du glissement, qui s'avèrent les directions denses $\langle 111 \rangle$?

Si la loi de Schmid s'avère bien rendre compte du comportement plastique pour la structure CFC, c'est loin d'être toujours le cas pour la structure CC, en partie du fait des interrogations sur les mécanismes élémentaires. Cette loi est-elle en défaut ou n'est-ce que son contexte est plus complexe ?

La loi d'écroutissage pour un monocristal s'établit à l'échelle des populations de dislocations interagissant, elles-mêmes liées aux mécanismes élémentaires de la plasticité. Sa forme pour la structure CC est donc elle aussi assujettie à la clarification des mécanismes élémentaires de mobilité, de déviation et d'intersection des dislocations dont la structure de cœur multi-planaire complique énormément les scénarios. Peut-on encore concevoir des systèmes de glissement indépendants dans ces conditions ?

Le présent travail est une nouvelle exploration expérimentale de cette problématique après presque trois décennies de pause durant laquelle les simulations numériques DD et DM ont considérablement éclairé la complexité de la plasticité des cristaux cubiques, CFC notamment et dans une moindre mesure CC. En revisitant les comportements en situations déjà étudiées autrefois avec les moyens expérimentaux d'aujourd'hui et l'appui des apports des simulations numériques aux échelles fines, le travail s'efforce d'apporter des éléments de réponse, pour l'ingénieur comme pour le chercheur, à ces questions toujours ouvertes.

Il s'appuie sur des essais menés in situ en microscopie électronique à balayage (MEB) et en microscopie à force atomique (AFM).