

Dynamique Moléculaire Contrainte et calculs de k critiques : simulation multi-échelle de la rupture

D. TANGUY et K. GOURIET

CNRS UMR 5146, Centre SMS, Ecole des Mines de Saint-Etienne, 158 cours Fauriel, 42023 Saint-Etienne

Résumé :

Nous présentons une première approche de la modélisation multi-échelle de la rupture semi-fragile dans les métaux cubiques à faces centrés. Un bref aperçu d'une simulation de la zone plastique par dynamique des dislocations discrètes permet de montrer l'intérêt d'effectuer des simulations atomistiques pour proposer des critères simples pour l'émission de dislocations depuis la fissure et la propagation, tout en soulignant l'importance de ces critères physiques pour les simulations de mécanique des milieux continus. L'émission de dislocations et la propagation de fissures sont étudiées par dynamique moléculaire contrainte dans le cas d'un monocristal sollicité en mode I et III, et dans le cas d'un bicristal en mode I, dans Al pur. On montre comment les facteurs d'intensité des contraintes sont définis à l'échelle atomique, de manière cohérente avec l'élasticité, ce qui assure le transfert de l'information vers la mécanique des milieux continus.

Mots clefs : dynamique moléculaire, dislocation, fissure.

1 Introduction

Dans cet article, on entend par "rupture semi-fragile" la propagation de fissures par décohesion (ce qui n'exclut pas une rugosité de surface significative à l'échelle atomique) dans une matrice où la déformation plastique est facile, comme cela peut parfois être le cas dans les métaux cubiques à faces centrées. Les systèmes expérimentaux qui nous intéressent sont les alliages d'aluminium, de nickel et les aciers austénitiques. Ils cassent de manière ductile en traction, dans des conditions "normales" de laboratoire (à l'air et à des vitesses de traction de l'ordre de 10^{-5} s^{-1}). L'exposition à un milieu agressif comme les milieux aqueux salins, l'eau pressurisée, l'irradiation, peut entraîner la production d'espèces (H, He) qui pénètrent le matériau et des ségrégations. Il en résulte une "fragilisation" des joints de grains.

Dans ces conditions, le mécanisme de rupture dépend finement de l'interaction entre ces solutés et les défauts cristallins (joints de grains, lacunes), dans la "zone endommagée" à la pointe de la fissure. On peut définir facilement la "zone endommagée", dans le cas où il n'y pas de dislocations, comme la zone autour de l'extrémité de la fissure qui ne suit pas l'élasticité linéaire. Elle peut se limiter à quelques atomes, dans le cas du clivage transgranulaire, ou s'étendre sur plusieurs unités structurales dans le cas de grains présentant une ségrégation fragilisante limitée. Modéliser ce type d'endommagement nécessite, dans l'absolu, de traiter la "zone endommagée" ab initio puisque, sous l'effet du gradient de contrainte extrême au voisinage de la pointe, les "liaisons chimiques" sont très distordues, donc difficilement modélisables *quantitativement* par des potentiels inter-atomiques empiriques, et les concentrations de défauts cristallins peuvent être importantes. De même, la présence de solutés, à des concentrations locales fortes et avec des coordinences exotiques, rendrait aussi l'utilisation de méthodes ab initio nécessaire, si cela était possible. Au delà de la zone endommagée, il faut considérer la configuration des dislocations de la zone plastique qui écrante la pointe et donne le chargement effectif ressenti par la "zone endommagée". Il est bien moindre que le chargement appliqué macroscopiquement. Là aussi, différentes méthodes existent, à différentes échelles (plasticité cristalline, dynamique des dislocations discrètes) et qui peuvent prendre en compte l'aspect polycristallin ou non. Il existe des méthodes hybrides, très ambitieuses, qui couplent une zone "ab initio" en extrême pointe de fissure, avec des calculs atomistiques classiques ("LOTF: learn on the fly" [1]), ou des

méthodes couplant atomistique et milieu continu [2-4].

Dans ce contexte, nous développons depuis quelques années une approche pragmatique de la modélisation "multi-échelle" de l'endommagement par l'environnement (principalement par l'hydrogène): (i) Nous utilisons des potentiels EAM, ou similaires [5], qui décrivent les métaux de manière semi-quantitative. L'intérêt, par rapport aux calculs *ab initio*, est à la fois de traiter un plus grand nombre de particules (un milieu fissuré) et aussi d'attaquer le problème de "l'échelle de temps" accessible aux simulations, soit en utilisant des techniques avancées (mise sous contrainte de certains degrés de liberté, dynamique accélérée), soit en effectuant des simulations de Monte Carlo avec un grand nombre de degrés de libertés (relaxations et lacunes). (ii) La ségrégation de solutés [7] (avec ou sans lacunes) est traitée par simulations Monte Carlo d'équilibre, ce qui donnera, à terme, des microstructures de joints présentant un degré de fragilisation variable et finement corrélé à la structure du joint, en particulier en présence de lacunes [8]. (iii) La rupture est traitée en dynamique moléculaire (DM) classique. L'objectif est de décrire, de manière qualitative, les grandes quantités de défauts ponctuels présents aux joints de grains, en pointe de fissure et en présence de solutés. A terme, on cherche à obtenir des cinétiques de propagation de fissure compatibles avec l'expérience. Il s'agit de vitesses de rupture "rapides" à notre échelle 1nm/ms, compatibles avec un essai de traction à 10^{-4} s^{-1} sur des matériaux pré-fragilisés. Les propagations lentes, de type corrosion sous contrainte, sont à traiter à une autre échelle. (iv) On tente de transmettre systématiquement l'information obtenue à l'échelle atomique vers les simulations "continues", soit sous la forme de modèles de zone cohésive, qui peuvent servir de conditions aux limites pour les calculs éléments-finis, soit sous forme de facteur d'intensité des contraintes critiques pour la dynamique des dislocations (DD). C'est sur ce dernier aspect que porte cet article.

L'article est organisé en trois parties. Nous présentons, tout d'abord, des résultats obtenus par dynamique des dislocations discrètes, concernant la modélisation de la zone plastique. On montre que le modèle de source utilisé ne permet pas d'obtenir un écrantage suffisant pour garantir un comportement "ductile". Ensuite, nous présentons la méthode de simulation DMC "dynamique moléculaire contrainte" qui permet de contrôler l'émission et le mouvement des dislocations lors de simulations DM. Nous montrerons comment cette méthode permet de traiter les interactions fissure-dislocation à l'échelle atomique, en parfait accord avec les solutions élastiques utilisées en DD. Elle a permis de vérifier que les facteurs d'intensité des contraintes définis à l'échelle atomique sont compatibles avec la DD et de définir le domaine de validité de la DD en ce qui concerne l'émission depuis la pointe. Une piste pour un meilleur modèle d'émission de dislocation est donnée. Enfin, des résultats concernant la propagation de fissures le long d'un plan cristallin $\{111\}$ et le long du joint de flexion symétrique $\Sigma 33(554)[110]$ sont donnés.

2 Rupture semi-fragile: un cas idéalisé traité par dynamique des dislocations discrètes, en 2D

La figure 1(a) montre la configuration de dislocations obtenue par dynamique des dislocations discrètes 2D pour une fissure immobile sollicitée en mode I [9]. Chaque croix représente une dislocation. La fissure est le long de l'axe X et s'étend des X négatifs jusqu'à (0,0) (fissure semi-infinie). Le domaine accessible aux dislocations est délimité par la droite $x=-5$ et le cercle centré à la pointe de la fissure (0,0) et de rayon $10 \mu\text{m}$. Il y a certainement un effet de la « taille de ce grain », mais qui n'est pas étudié. Tous les résultats présentés sont obtenus pour des chargements où l'écrantage porté par les dislocations stockées sur le joint de grain extérieur représente moins de 10% de l'écrantage total. Une interface impénétrable s'étend à l'avant de la pointe. De manière similaire à Roberts, cette simulation utilise des champs de contraintes analytiques obtenus par la méthode des potentiels complexes qui tiennent compte de la fissure semi-infinie et de toutes les dislocations présentes. Le chargement extérieur est pris en compte par un facteur d'intensité des contraintes appliqué K_{app} . Le calcul étant en 2D, les boucles de dislocations sont représentées par des dipôles coins. Des sources de Frank-Read sont distribuées dans tout le domaine de simulation. Elles sont activées quand le cisaillement local reste supérieur à une contrainte seuil pendant une durée suffisamment longue (1ns). Pour le cas présenté, où les constantes élastiques représentent un acier austénitique, le seuil est à 84MPa. Il dépend de la source avec un écart type de 15MPa. Cette distribution de résistance des sources permet un passage doux de la limite élastique lors des simulations en traction sans fissure. Une fois émises, les dislocations avancent sous l'action de la force de Peach et Koehler avec une vitesse proportionnelle à la

force. Des interactions non élastiques entre les dislocations sont aussi considérées: la formation de jonctions et l'interaction avec des obstacles sont nécessaires pour obtenir un durcissement d'écrouissage. Deux bandes de glissement intenses, symétriques, sont clairement visibles sur Fig.1a. Il y a une différence notable de morphologie entre elles. Celle du demi-plan supérieur est très fine et correspond à un unique plan de glissement. Elle est créée par l'émission de dislocations "directement depuis la pointe de la fissure". Celle du dessous est plus épaisse et provient de l'activation de plusieurs sources au voisinage de la pointe. Le glissement dévié n'est pas autorisé.

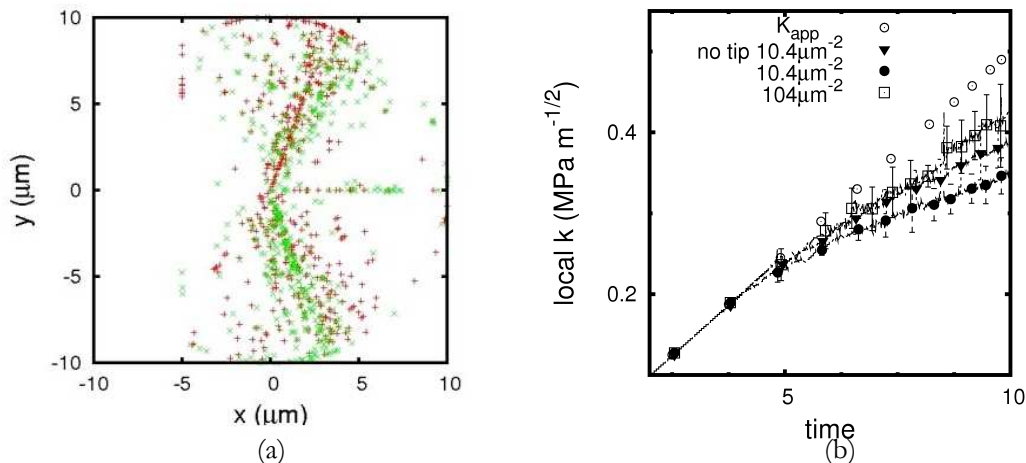


Figure 1 : Simulation de la déformation plastique en pointe de fissure par dynamique des dislocations 2D. (a) Configuration de dislocations, (b) évolution du facteur d'intensité des contraintes local au cours du temps. La dissymétrie provient de l'émission depuis la pointe, uniquement vers le grain du dessus. L'influence de la répartition des sources et des obstacles est quantifiée dans [9], en effectuant 10 calculs indépendants pour chaque jeu de paramètres. Tous les commentaires, analyses... sont faits à partir de ce qui a été identifié comme le comportement « dominant ».

En présence d'une dislocation, le champ de contrainte présente la même singularité que dans le cas de la fissure seule. Le facteur d'intensité de contrainte k_{local} dépend de la position de toutes les dislocations du système par rapport à la pointe de la fissure. k_{local} ne décrit vraiment le champ de contrainte qu'en dehors de la zone endommagée, non linéaire, et plus près de la pointe de la fissure que la position de la première dislocation. Donc, il est possible que dans certains cas, il n'ait pas d'utilité, voire même d'existence. On reviendra sur ce point au paragraphe suivant. Dans le cas idéalisé de la simulation de DD présentés ici, k_{local} existe et peut être calculé par développement limité des potentiels complexes au voisinage de la fissure [11]. La figure 1b montre sa variation au cours du temps pour trois types de simulations: sans émission depuis la pointe, avec émission depuis la pointe et avec émission depuis la pointe et une forte densité d'obstacles. On voit que l'émission depuis la pointe, ainsi que l'empilement qu'elle génère, contribue de manière significative à l'écrantage. L'écrantage est défini comme la différence entre K_{app} et k_{local} . Cependant, le problème majeur est que même si k_{local} croît moins vite que K_{app} , il atteint quand même des valeurs élevées très rapidement. Typiquement, k_{Ic} est atteint pour K_{app} de l'ordre de $2 \cdot k_{Ic}$ au lieu de $10 \cdot k_{Ic}$ expérimentalement. Le modèle tel qu'il est conçu et même s'il est ajusté (densité d'obstacles, force des jonctions, seuil pour l'activation des sources) pour reproduire qualitativement la courbe de traction (Re et écrouissage), ne fournit pas suffisamment de dislocations pour écranter la fissure d'une manière comparable à ce qui est observé expérimentalement. Il peut y avoir au moins trois causes: l'émission depuis la pointe émousse la fissure et alors k_{Ic} est plus élevé que la valeur théorique; la manière dont on estime k_{Ic} se base sur des mécanismes qui ne sont pas ceux qui entrent en jeu expérimentalement (on y reviendra dans la dernière partie de l'article); le modèle d'émission implémenté en DD n'est pas physique. Nous commençons par analyser l'émission depuis la pointe dans le cas simple de la fissure fine le long d'un plan {111} par simulations atomistiques et calculs élastiques.

3 k_{local} : calculs élastiques et atomistiques des interactions dislocation-fissure

Le chargement critique pour émettre une dislocation depuis une pointe de fissure est obtenu en effectuant une série de relaxations de fissures, en DM trempée, à des niveaux de chargement croissant. Dans le calcul atomistique, le chargement est obtenu en appliquant un déplacement U au bord de la boîte, perpendiculairement au plan de la fissure (mode I). La fissure est située au centre d'une boîte dont les

dimensions sont entre 5 et 10 fois la taille de la fissure (Fig.2b). La configuration initiale est la solution élastique, pour une fissure de longueur $2a$ et un chargement à l'infini correspondant à $C_{11} U/L$, où C_{11} est la constante élastique dans la direction de traction et L la longueur de la boîte dans cette direction. L'énergie du système est minimisée jusqu'à ce que les forces sur toutes les particules soient inférieures à 10^{-3} eV/A. On considère alors que le système est à l'équilibre mécanique. Les profils de contraintes sont calculés en utilisant la formule du Viriel qui donne des contraintes cohérentes entre atomistique et milieu continu, à $T=0$. En faisant un ajustement de la solution élastique sur les profils de contraintes atomistiques, on peut trouver les valeurs de a et σ_{app} qui donne le meilleur accord. A partir de ces valeurs, on définit le facteur d'intensité des contraintes appliqué à la pointe de la fissure atomistique. Pour chaque valeur de U , un calcul de relaxation est effectué, la valeur de k est mesurée sur le profil de contrainte d'ouverture et la structure de la pointe de la fissure est caractérisée. En particulier, l'émission de dislocations est détectée. Pour le potentiel Aslanides-Pontikis pour Al [6], la première partielle de Shockley est émise pour $k_{Ie}=0.64k_{IG}$, où k_{IG} est le chargement critique de Griffith défini à partir de l'énergie de formation de la surface. La fissure est donc intrinsèquement ductile puisque le système relaxe les contraintes en émettant une dislocation avant d'atteindre la seuil pour la propagation. En superposant un chargement en mode III, la deuxième partielle est émise. Le potentiel [6] reproduit des constantes élastiques approchées isotropes, la contrainte théorique à rupture dans la direction $\{111\}$, l'énergie de faute d'empilement, l'énergie d'empilement instable et la séparation entre partielle dans Al.

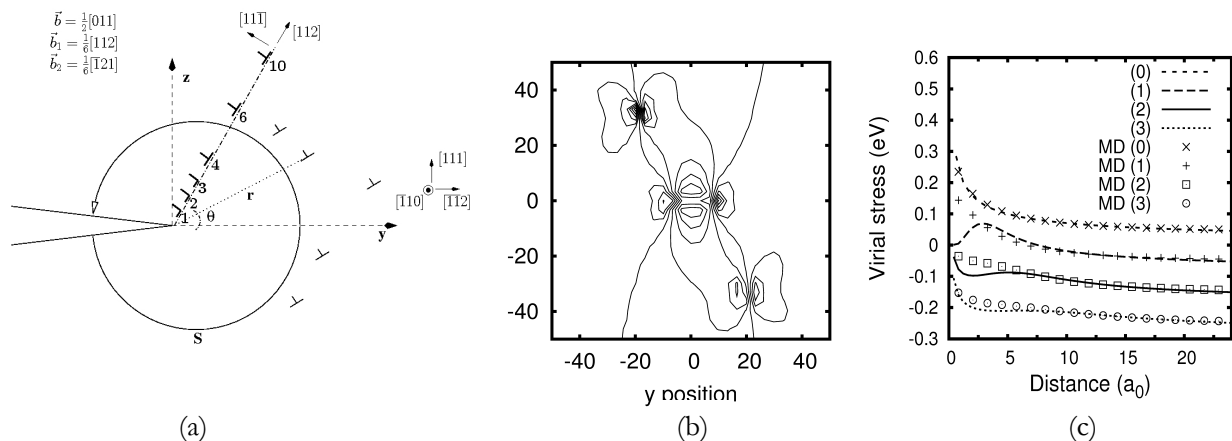


Figure 2 : Interaction dislocation-fissure simulée par dynamique moléculaire contrainte et calcul élastique. (a) Représentation schématique des différentes positions où la dislocation est épinglée, (b) carte de la contrainte d'ouverture σ_{zz} obtenue en atomistique (système $50\text{nm} \times 50\text{nm} \times 3\text{nm}$, déplacement imposé rigide uniforme dans la direction de traction et conditions périodiques dans les directions transverses), (c) comparaison atomistique/élasticité pour une Shockley attachée à la pointe par un ruban de faute. L'unité de longueur est le paramètre de maille de Al ($a_0=4.03\text{\AA}$).

La dislocation parfaite, écranante, peut glisser facilement dans la boîte et s'éloigner de la fissure. La méthode CMD [4] est utilisée pour épingler la dislocation à des positions pré-déterminées (Fig. 2a). Un calcul de minimisation d'énergie est effectué pour chaque position de la dislocation. Ceci donne accès aux champs de contraintes d'équilibre pour le système fissure-dislocation. La figure 2 b montre une carte de contrainte (tractions perpendiculaires au plan de la fissure). On reconnaît, au centre, le champ de la fissure. Deux dislocations parfaites ont été émises, de manière symétrique par rapport au centre de la fissure. Elle sont épinglées à une distance qui correspond à la configuration 10 de Fig. 2a, soit 15nm de la pointe.

En ne considérant que la composante de la dislocation parfaite qui est incluse dans le plan de la figure 2 et qui porte tout l'écrantage du mode I, on peut construire le même problème en élasticité. Le vecteur de Burgers est la projection du vecteur de Burgers atomistique; les constantes élastiques sont celles calculées à partir du potentiel inter-atomique et l'orientation du plan de glissement est celle du plan $\{111\}$ le plus sollicité en cisaillement. On obtient un accord parfait entre le profil de contrainte atomistique et celui obtenu à partir des potentiels complexes [11], une fois que la dislocation parfaite est formée. Ceci a lieu quand la dislocation est déjà significativement éloignée de la pointe de la fissure, entre 4.5 et 6nm, des distances grandes par rapport à la taille de la zone non linéaire en pointe de fissure (quelques atomes) et à la taille du coeur de la dislocation de Shockley. Cette distance correspond à peu près à la longueur du ruban de faute d'empilement quand seule la première partielle est nucléée. La figure 2c montre la différence entre la

solution élastique et le profil de contrainte atomistique quand seule la première Shockley est formée [12]. Il ne faut donc pas se servir des formules élastiques pour des dislocations plus proches que 6nm de la pointe de la fissure, ce qui pourrait être intéressant par exemple pour simuler l'entrée d'hydrogène dans le matériau.

Le modèle d'émission depuis la pointe que nous avons utilisé en dynamique des dislocations est du même type que celui utilisé par Roberts: une source de Frank-Read, identique à celles du volume, placée à 100nm de la pointe. Quand un dipôle est émis, la dislocation anti-écrantante est directement avalée par la pointe, alors que celle qui écranthe la pointe de la fissure apparaît dans la simulation à 200nm de la pointe. La contribution d'une dislocation à k_{local} décroît comme l'inverse de la racine carrée de la distance à la pointe. Une dislocation émise, artificiellement, à 200nm est donc environ 10 fois moins écranthante qu'une partielle de Shockley ou qu'une parfaite qui vient juste d'être émise. Un critère d'émission basé sur la valeur de k_{Ic} calculée en atomistique, avec une dislocation parfaite placée à 6nm de la pointe pourrait améliorer l'écranthage de manière significative. Il est difficile de conclure sans tester cette modification car la contrainte est très élevée aussi près de la pointe, donc la dislocation devrait rapidement s'en éloigner. D'une manière générale, c'est la fréquence d'émission et la densité de l'empilement dynamique à la pointe qui donne l'écranthage. Pour avoir un modèle plus complet d'émission, nous étudions actuellement l'influence d'un chargement mixte. Enfin, il faut signaler que même si l'émission n'est pas thermiquement activée dans le cfc, ce sont des boucles qui sont émises, et que la présence de crans peut modifier k_{Ic} .

4 Calcul des k critiques locaux

Le deuxième aspect de la rupture semi-fragile est la "décohésion" à la pointe de la fissure. D'une manière similaire à ce qui est fait pour l'émission (en particulier, mêmes conditions aux limites), des séries de simulations à niveaux de chargement croissant sont effectuées, k est mesuré et la structure de la pointe est observée. La dynamique moléculaire contrainte (DMC) est là encore utilisée, mais en contraignant les particules proches de la pointe (particules gris clair sur Fig. 3a), pour empêcher l'émission depuis la pointe [10]. Dans les configurations intrinsèquement ductiles, comme la fissuration le long de plans {111}, ce type de calcul donne accès à des configurations qui n'existent normalement pas, puisque les partielles sont émises spontanément pour relaxer la contrainte. Les valeurs de k_{Ic} obtenues donnent alors une quantification de la proximité d'une transition ductile-fragile. Plus généralement, DMC permet d'étudier la propagation de fissures modèles dans n'importe quelle orientation cristallographique, sans se préoccuper a priori de l'orientation des plans de glissement, ce qui est très pratique. La figure 3 présente deux exemples de fissures intrinsèquement ductiles, dont on a obtenu la propagation fragile par DMC: une fissure fine le long du plan {111} propage pour $k_{Ic}=k_{IG}$, et la fissure émoussée propage le long du joint de flexion symétrique $\Sigma 33(554)[110]$ pour $k_{Ic}=1,17 k_{IG}$. Dans le cas du joint, on remarque que la fissure progresse par formation de cavités, puis coalescence. L'effet de la température est important ici. Il est en cours d'étude. Concernant la fiabilité du potentiel : les niveaux de contraintes étant très élevés en pointe de fissure (jusqu'à 6GPa), il n'est pas étonnant que la faute d'empilement s'étende (Fig.3b), même si l'énergie de faute est importante dans Al. Le maillage a été observé dans Al dans un polycristal à grains nanométriques. Pour autant, il serait naïf de prétendre qu'un potentiel empirique puisse reproduire de manière quantitative les forces en pointe de fissure, là où la coordinence des atomes est exotique (surface et distorsions). Ça n'est nullement notre intention ici. Néanmoins, tout en restant qualitatif, les calculs atomistiques que nous présentons sont bien utiles pour développer une approche multi-échelle (en attendant les résultats de « orbital free DFT » appliqué en pointe de fissure (G. Lu et E. Carter).

5 Conclusion:

Dans cet article, nous avons montré dans des cas simples comment étudier les phénomènes qui se passent en pointe de fissure tout en caractérisant le chargement mécanique en cohérence avec l'élasticité. Ceci permet de définir des facteurs d'intensité des contraintes critiques pour l'émission de dislocations et différents mécanismes de propagation. Ils peuvent, en principe, être utilisés en dynamique des dislocations. Dans le cas des interactions dislocation-fissure, nous avons montré que les champs de contraintes élastiques issus de la méthode des potentiels complexes ne sont valables que quand la dislocation parfaite est formée et significativement éloignée de la pointe de la fissure (6nm). Notons que l'utilisation de ces équations pour une partielle de Shockley attachée à la pointe par un ruban de faute, par exemple pour la ségrégation d'impuretés,

donnerait un résultat très faux car elles donnent des contraintes nulles à la pointe, et un maximum en avant de celle-ci, donc une zone de piégeage élastique qui n'est pas physique.

Les perspectives sont: (i) d'étudier l'effet d'un chargement mixte sur l'émission et sur la propagation de la fissure fine, (ii) d'étudier l'effet de la température sur la propagation intergranulaire, (iii) à terme, d'étudier la propagation le long d'un joint comportant des ségrégations données par simulations Monte Carlo.

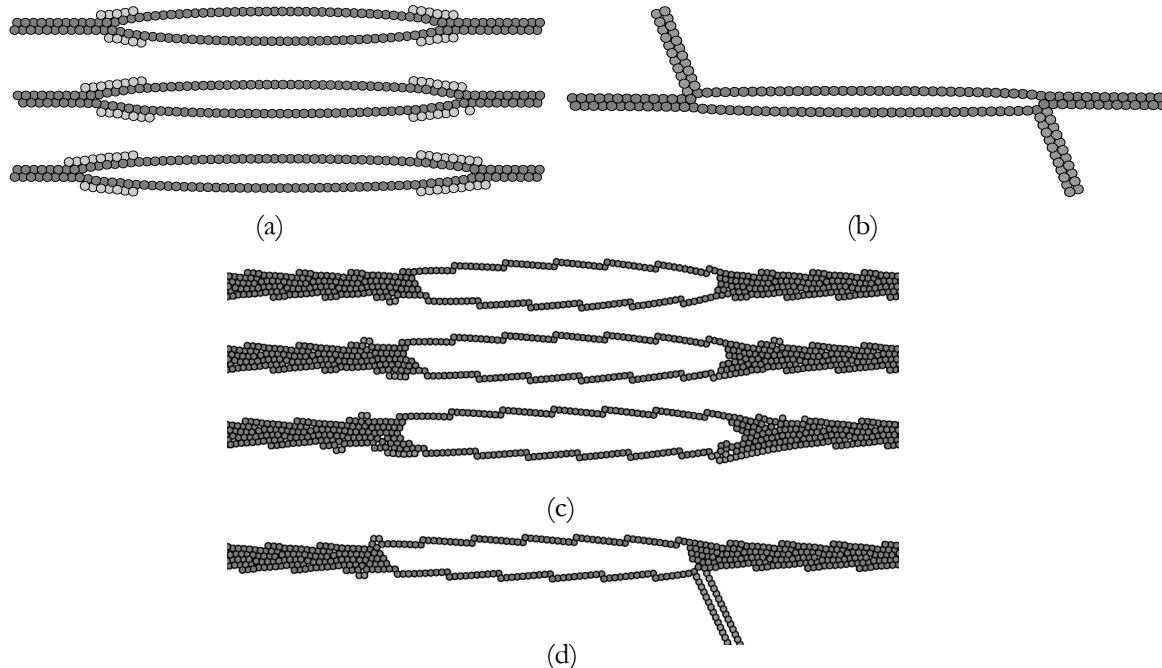


Figure 3 : (a) Fissure le long d'un plan $\{111\}$ sollicitée en mode I, les particules gris clair sont contraintes pour empêcher l'émission de dislocations depuis la pointe ; (b) fissure non contrainte avec deux parties de Shockley attachée à la pointe, en mode I pur ; (c) fissure contrainte se propageant le long d'un joint de flexion ; (d) maillage à la pointe de la fissure. Le potentiel est Aslanides-Pontikis pour Al [5].

Remerciements:

Ce travail est financé, en partie, par l'ANR Blanc Hiner (ANR-06-BLAN60231).

Références:

- [1] Csanyi G et al. Phys. Rev. Letters **93** (2004) art. 175503
- [2] Kohlhoff S, Gumbsch P and Fischmeister H F, Phil. Mag. A **64** (1991) p.851
- [3] L.E. Shilkrot, R.E. Miller and W.A. Curtin, J. Mech. Phys. Solids **52** (2004) p.755
- [4] E.B. Tadmor, M. Ortiz, R. Phillips, Phil. Mag. A **73** (1996) p.1529
- [5] S.G. Roberts in « Multiscale Phenomena in Plasticity » Ed. J. Lépinoux, D. Mazière, V. Pontikis et G. Saada, NATO Science Series E **367** (2000) p. 349
- [6] A. Aslanides and V. Pontikis, Philos. Mag. Lett. **78** (1998) p.377
- [7] D. Tanguy and T. Magnin Phil. Mag. **83** (2003) pp. 3995-4009
- [8] E. Vamvakopoulos and D. Tanguy Phys. Rev. B **79** (2009) art. 094116
- [9] « Plasticity localization ahead of a crack tip modeled by 2D discrete dislocation dynamics » D. Tanguy, D. Delafosse, and M. Razafindrazaka (submitted to Phil Mag)
- [10] D. Tanguy Phys. Rev. B **76** (2007) art. 144115
- [11] Lin IH, Thomson R. Acta Metall 1986; 34:187.
- [12] D. Tanguy, M. Razafindrazaka and D. Delafosse Acta Mater. **56** (2008) 2441–2449