

Modélisation du durcissement par solution solide des alliages métalliques cubiques à faces centrées

S. Patinet^a, L. PROVILLE^b

a. PMMH, UMR 7636 CNRS/ESPCI/P6/P7, 10 rue Vauquelin, 75231 Paris cedex 05, France
b. CEA/DEN, Service de Recherches de Métallurgie Physique, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

Résumé :

Nos travaux portent sur la modélisation du durcissement par solution solide, c'est-à-dire de la diminution de la mobilité des dislocations due à l'ajout d'atomes de soluté. Nous étudions cet aspect de la plasticité en traitant par simulation à l'échelle atomique (potentiels empiriques de type EAM) l'interaction entre dislocation et atomes de soluté en position substitutionnelle. Nous montrons que l'ancrage des dislocations coin et vis est du même ordre de grandeur. Le développement d'un modèle de tension de ligne nous permet de reproduire quantitativement la contrainte d'écoulement calculée à partir des simulations atomistiques et de comparer simulations et expériences pour un système de taille micrométrique.

Abstract :

Our work focuses on modeling the solid solution hardening, i.e. the decreased of dislocation mobility due to the addition of solute. We study this aspect of plasticity by performing simulations at the atomic scale (EAM empirical potential) of the interaction between dislocation and substitutional solute atoms. We show that the pinning of screw and edge dislocations have the same order of magnitude. The development of a line tension model allows us to reproduce quantitatively the flow stress calculated from atomistic simulations and compare simulations with experiments for a micrometer size system.

Mots clefs : dislocation, durcissement par solution solide, simulation atomistique

1 Introduction

Établir le lien entre l'échelle microscopique et le comportement mécanique macroscopique d'un matériau est un défi important de la physique du solide. En particulier, lorsqu'un matériau métallique est soumis à une sollicitation mécanique, il existe un seuil de contrainte pour lequel la déformation du solide est irréversible. L'identification des mécanismes microscopiques responsables de l'existence de cette limite d'élasticité est cruciale car elle entre en jeu dans la conception de toutes les structures métalliques. Une déformation plastique se traduit généralement au niveau atomique par la mise en mouvement et la multiplication des dislocations. Dès lors, empêcher le mouvement des dislocations revient à accroître la limite d'élasticité et donc à durcir le métal. Si les différentes barrières affectant la mobilité des dislocations sont connues, la prédiction quantitative de la limite d'élasticité résultant de phénomènes multi-échelles demeure une des difficultés majeures. Une des techniques métallurgiques classique de durcissement consiste à incorporer à la matrice des éléments d'alliage. Ces solutés forment, une fois en solution, des points d'ancrage pour les dislocations. Ce phénomène de durcissement par solution solide (DSS) permet, notamment dans les métaux cubiques à faces centrées (CFC), d'augmenter la limite d'élasticité sans perte notable de ductilité.

Le bilan des travaux précédents montre que le phénomène de DSS est clairement caractérisé [1]. La variation de la limite d'élasticité observée expérimentalement avec la concentration en soluté a été modélisée théoriquement et reproduite par simulation [2,3]. Néanmoins, les différentes approches théoriques développées font appel le plus souvent à des ajustements et restent cantonnées à un niveau qualitatif ne permettant pas la comparaison entre alliages. En outre, la description élastique linéaire de l'interaction des solutés avec le cœur de la dislocation, siège de grandes déformations, est erronée. Il apparaît donc opportun

de réexaminer au niveau atomique ces questions de base en utilisant la simulation numérique qui permet de modéliser le cœur des dislocations afin d'améliorer la description théorique du DSS dans les métaux CFC.

Pour ce faire, nous avons mis en œuvre des simulations atomistiques du glissement d'une dislocation dans une solution solide qui utilisent des potentiels interatomiques empiriques de type EAM (*Embedded atom model*). Nous nous cantonnons dans cette étude aux simulations de relaxation statique modélisant le durcissement dans la limite des températures nulles. Nous profitons des opportunités des techniques numériques pour comparer deux alliages aux propriétés physiques différentes, Ni(Al) et Al(Mg). Nos simulations portent également sur la comparaison des différents types de dislocations: coin et vis. Nous avons cherché par cette démarche de comparaison à enrichir notre compréhension du DSS en éprouvant les prédictions des modèles et leurs cohérences vis-à-vis des simulations ainsi que des résultats expérimentaux.

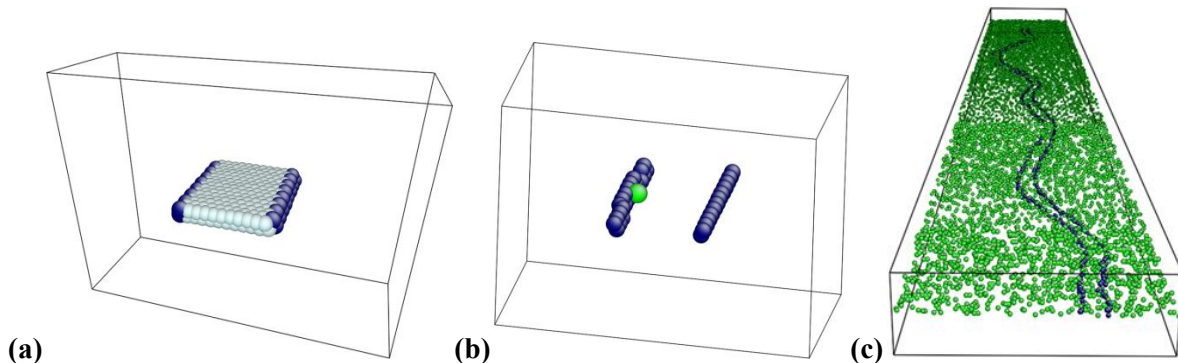


FIG. 1 – Images caractéristiques des simulations atomistiques. Les atomes représentés correspondent aux dislocations partielles (bleu foncé), à la faute d'empilement (bleu clair) et aux atomes de soluté substitutionnel (vert clair) contenus dans le plan de glissement. (a) dislocation dissociée d'un métal pur cubique à faces centrées, (b) dislocation ancrée par un soluté, (c) dislocation ancrée dans une solution solide.

Comme schématisé sur la figure 1, nous suivons une approche multi-échelle partant du système le plus simple vers le système le plus complexe. Notre démarche s'appuie sur l'étude de l'interaction élémentaire entre les dislocations et les solutés isolés pour aboutir à la modélisation du seuil de glissement d'une dislocation interagissant avec une population aléatoire d'impuretés.

2 Méthode de simulation

A la vue des problématiques soulevées dans les travaux scientifiques précédents [1-3], nous orientons nos investigations dans deux directions principales : calculer les paramètres physiques décrivant le DSS et comparer les alliages CFC de matrice différente. La description du glissement d'une dislocation dans une solution solide nécessite de pouvoir décrire un grand nombre d'atomes, de l'ordre du million. Pour ce faire, nous mettons en œuvre des simulations atomistiques qui utilisent des potentiels interatomiques empiriques. Cette méthode nous permet de traiter explicitement le cœur des dislocations en offrant un coût de calcul raisonnable. Nous simulons deux alliages CFC, Ni(Al) et Al(Mg), dont les potentiels de type EAM ont été développés respectivement par Rodary et al. [4] et Liu et al. [5]. La forme fonctionnelle de ces potentiels reproduit de manière satisfaisante les propriétés des métaux de transition CFC [2].

Le système de dislocation étudié dans nos travaux suit la méthode de simulation développée par Rodney et Martin [6]. Nous simulons un système composé d'une dislocation isolée, coin ou vis, dans une lame mince (figure 1). Afin de minimiser les effets de taille finie du système, des conditions périodiques sont imposées dans la direction de la ligne de dislocation ainsi que la direction de glissement de la dislocation. Dans la direction perpendiculaire au plan de glissement des conditions de surfaces libres sont appliquées. Les atomes appartenant aux surfaces supérieures et inférieures du cristal sont contraints à une dynamique à deux dimensions en leur imposant une hauteur constante. Nous choisissons une taille de boîte de simulation avec laquelle nous travaillons tout au long de notre étude de sorte que la géométrie des cœurs de dislocations ne change qualitativement pas par rapport à des tailles de systèmes supérieures. La longueur du système dans la direction de la ligne de dislocation varie quant à elle en fonction du type de simulation réalisée (figure 1).

Les conditions aux limites de bord libre nous permettent d'appliquer une contrainte sur les surfaces supérieures et inférieures du cristal. Cette contrainte est créée par l'ajout d'une force supplémentaire sur chaque atome des surfaces libres. Pour que la contrainte soit résolue, c'est-à-dire projetée dans le plan de

glissement, la direction des forces appliquées aux atomes est parallèle aux surfaces libres. Par l'intermédiaire de la force de Peach-Koehler, cette contrainte nous permet d'exercer une force par unité de longueur sur les dislocations et de faire interagir ces dernières avec des obstacles.

Afin de relaxer l'énergie potentielle du système nous utilisons une forme de l'algorithme de trempe rapide développée par Bitzek et al. [7]. L'algorithme fait converger le système vers son état d'énergie potentielle minimum nous donnant accès aux configurations stables des dislocations. Des simulations statiques sont également réalisées sous contrainte avec le même algorithme ce qui conduit cette fois à minimiser l'enthalpie du système. Ces simulations nous permettent d'étudier l'interaction entre une dislocation et un obstacle et de calculer la contrainte à partir de laquelle il n'existe plus de position stable pour la dislocation. Trois types de simulations atomistiques ont ainsi été réalisés : relaxation d'une dislocation dans une matrice métallique pure (figure 1a) ; calcul de la contrainte critique de franchissement d'un soluté isolé (figure 1b) ; calcul de la contrainte d'écoulement dans une solution solide en fonction de la concentration en soluté (figure 1c).

3 Détermination des paramètres physiques du DSS

Nous résumons ici les propriétés des dislocations dans les matrices métalliques pures ainsi que les paramètres élémentaires décrivant l'interaction dislocation-soluté. Un lecteur intéressé par des données plus quantitatives pourra se reporter aux références [3,8-9].

3.1 Propriétés d'une dislocation dans une matrice métallique pure

A la suite de l'introduction d'une dislocation parfaite dans le cristal, il apparaît au cours de la relaxation que la dislocation se dissocie en deux dislocations partielles. Les cœurs de ces dislocations partiels de Shockley, concentrant la déformation, s'étalent dans les plans de glissement. L'étalement des cœurs et la distance de dissociation sont moins importants pour les dislocations vis que pour les dislocations coin. Pour un même caractère de dislocation, ils sont plus petits dans l'Al que dans le Ni. Ces résultats peuvent être reliés aux énergies de fautes d'empilement du Ni et du Al dont les valeurs effectives pour les potentiels utilisés sont respectivement $\gamma^{Ni} = 89 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$ et $\gamma^{Al} = 109 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$.

L'application d'une contrainte sur un système ne contenant pas d'impureté nous permet de calculer le couplage entre les dislocations partielles et la force de friction du réseau appelée contrainte de Peierls. Une tendance inverse à la dissociation est logiquement observée en ce qui concerne le couplage entre dislocations partielles. Les couplages sont ainsi plus importants pour les dislocations vis que pour les dislocations coin et, pour un même caractère de dislocation, ils sont plus grands dans l'Al que dans le Ni. Les contraintes de Peierls calculées sont relativement faibles et peuvent être également reliées à l'étalement des cœurs des dislocations partielles. La modélisation de la rigidité des dislocations dans l'approximation de la tension de ligne indique que les dislocations vis sont environ 4 fois plus rigides que les dislocations coin. Ces propriétés des dislocations (géométrie des cœurs, couplage entre dislocations partielles, contrainte de Peierls et tension de ligne) nous servent de base physique pour comprendre l'interaction entre dislocation et obstacle [8-9].

3.2 Interaction d'une dislocation avec un soluté

En vue d'identifier l'origine du DSS, nous nous sommes focalisés sur une configuration mettant en présence une seule dislocation de type coin ou vis avec un atome de soluté isolé (figure 1b). Nous avons déterminé par simulations statiques les forces d'ancrage et la portée d'interaction caractérisant un obstacle en fonction de sa position. L'ancrage des dislocations par les atomes de soluté réside essentiellement dans les effets de taille, de module et d'interaction avec le ruban de faute d'empilement.

Nous avons décrit l'interaction statique entre dislocations et obstacles dans les alliages de Ni(Al) et Al(Mg) en fonction de la position des atomes de soluté. Loin du plan de glissement, la théorie élastique permet de modéliser l'interaction dislocation-soluté à condition de prendre en compte l'étalement des cœurs des dislocations partielles. Dans les plans contigus au plan de glissement, les effets anharmoniques et de ruban de faute d'empilement expliquent qualitativement les forces d'ancrage calculées à partir de l'interaction non-linéaire entre le cœur des dislocations partielles et les obstacles situés dans le plan de glissement. Nous observons que les dislocations vis possèdent des forces d'ancrage du même ordre de grandeur que celles des dislocations coin. Nous montrons également que la portée d'interaction peut être reliée à l'étalement des cœurs de dislocation dans le plan de glissement [8]. Ces quantités (force d'obstacle et portée d'interaction)

constituent les paramètres élémentaires d'entrée des modèles analytiques de champ moyen décrivant le DSS dans la limite d'une température nulle.

4 Augmentation de la contrainte d'écoulement avec la concentration en soluté

4.1 Simulations atomistiques du DSS et modèles de champ moyen

Pour modéliser le DSS à proprement parler, c'est-à-dire le seuil de propagation d'une dislocation dans un alliage, nous simulons par relaxation statique l'interaction d'une dislocation avec une population d'atomes de soluté distribués aléatoirement (figure 1c). Nous calculons les contraintes d'écoulement en fonction de la concentration en soluté pour les deux types de dislocations coin et vis dans les deux alliages modèles de Ni(Al) et Al(Mg). La contrainte d'écoulement statique augmente avec la concentration en soluté suivant des statistiques différentes dans les deux alliages (figure 2). Nous observons que le durcissement provenant des dislocations de caractère coin et vis est du même ordre de grandeur [8-9]. Ce résultat remarquable explique notamment l'isotropie des microstructures de dislocation des alliages CFC observée expérimentalement.

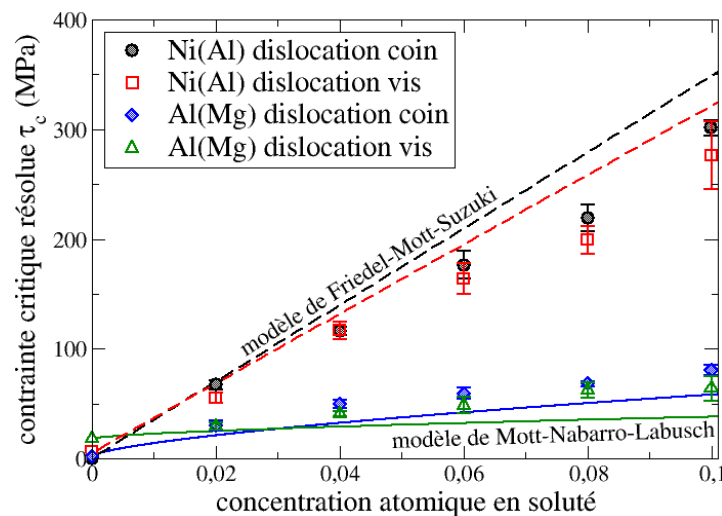


FIG. 2 – Contrainte critique résolue de glissement pour les dislocations coin et vis dans les solutions solides de Ni(Al) et Al(Mg) en fonction de la concentration en soluté. Les courbes correspondent aux prédictions des modèles de champs moyens les plus adéquates [10-11] calculées sans paramètres ajustables.

Ces simulations atomistiques du seuil de glissement de dislocation au sein de solutions solides modèles sont l'occasion de confronter les simulations atomistiques aux prédictions des modèles analytiques de DSS lesquels ont été passés en revue dans [9]. Pour calculer le DSS à une température nulle, ces modèles de champ moyen nécessitent de formuler plusieurs hypothèses classiques : le DSS peut être calculé à partir de l'interaction unique entre un atome d'impureté isolé et une dislocation; ces modèles ne prennent en compte que les obstacles situés dans le plan de glissement ancrant plus fortement les dislocations; ils considèrent une distribution de solutés parfaitement aléatoire. Leur démonstration suit globalement une même démarche qui consiste à supposer une configuration critique d'ancrage. À cette configuration est associée une statistique d'interaction et une longueur moyenne. La contrainte critique est alors déduite en écrivant l'équilibre entre la force de Peach-Koehler exercée sur la dislocation et la force d'ancrage le long de la longueur caractéristique.

Afin de comparer les simulations atomistiques avec les modèles analytiques sans paramètre ajustable, nous mettons en œuvre les théories du DSS en utilisant les paramètres d'interaction dislocation-soluté déterminés précédemment (tension de ligne, force d'obstacle et portée d'interaction). Cette comparaison rigoureuse montre seulement un accord qualitatif mais surtout, les modèles de champ moyen ne permettent pas de comprendre les différentes statistiques de durcissement pour des alliages de matrices différentes. Il est notamment nécessaire de changer de modèle en fonction de l'alliage considéré, ce qui n'est pas satisfaisant.

4.2 Modèle de tension de ligne

Afin de résoudre la difficulté soulevée précédemment et disposer d'un modèle unique à même de décrire le DSS dans des alliages de matrices différentes, nous développons un modèle de tension de ligne (TL) schématisé sur la figure 3. Ce dernier nous permet de simuler explicitement l'interaction d'une dislocation

dissociée (dont les dislocations partielles sont couplées élastiquement) avec une population d'obstacles de plusieurs natures [12].

Le modèle est paramétré pour reproduire les caractéristiques physiques d'une dislocation dissociée ainsi que les interactions dislocation-obstacles. Les ajustements de la tension de ligne des deux dislocations partielles et de leur couplage sont réalisés à partir de simulations à l'échelle atomique statiques d'une dislocation dans un métal pur. Les potentiels d'interaction dislocation-obstacle, nous permettant d'avoir accès à la force exercés par les solutés sur les dislocations, sont obtenus à partir de simulations statiques d'interaction d'une dislocation avec un obstacle unique. Différents types d'obstacles sont étudiés : solutés isolés pour différentes distances par rapport au plan de glissement et paires de solutés. Notons finalement que la variation de l'énergie de faute d'empilement avec la concentration en soluté est prise en compte et ajustée sur des simulations atomistiques de faute d'empilement. Pour les deux alliages, elle diminue avec la concentration ce qui diminue le couplage entre les dislocations partielles. Tous les paramètres physiques du modèle de TL sont par conséquent obtenus à partir de simulations à l'échelle atomique indépendantes.

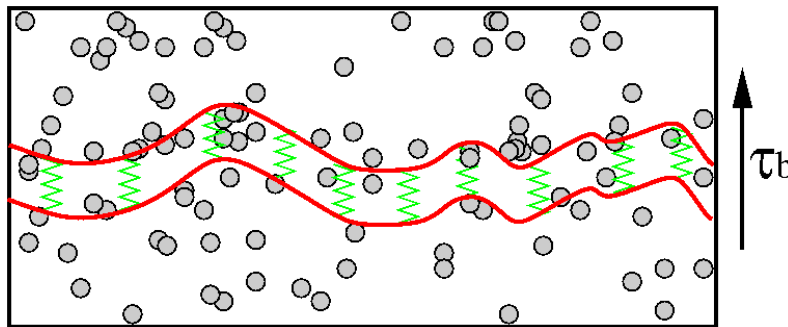


FIG. 3 – Schéma de principe des simulations de tension de ligne. La dislocation coin dissociée est modélisée comme deux lignes élastiques de raideur constante (approximation de la tension de ligne) couplées élastiquement. La dislocation interagit avec des obstacles de natures différents distribués sur un réseau discret de symétrie CFC d'une épaisseur de 8 plans (4 au-dessus et 4 en dessous du plan de glissement).

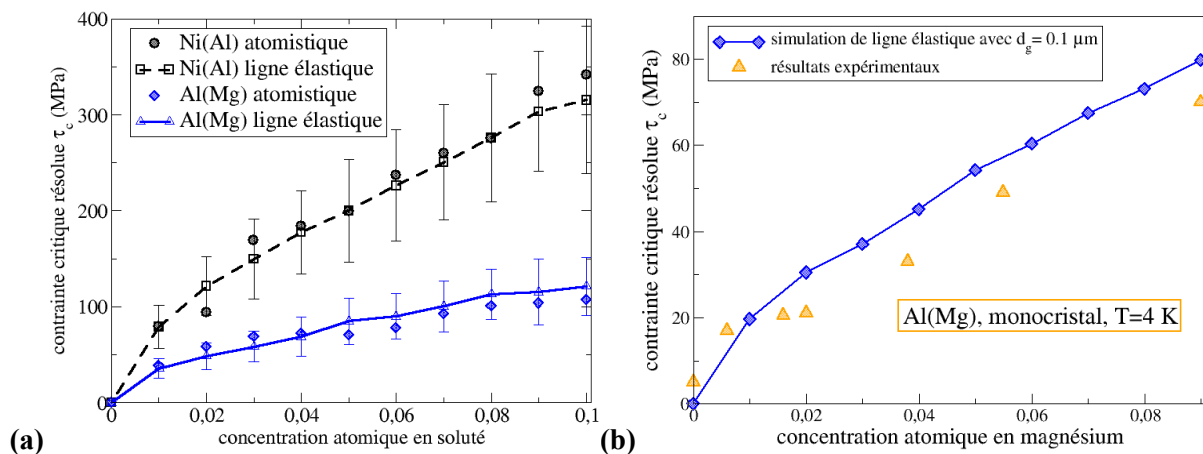


FIG. 4 – Contrainte critique de glissement pour une dislocation coin dans les solutions solides de Ni(Al) et Al(Mg) en fonction de la concentration en soluté. (a) Comparaison entre calculs atomistiques et calculs de tension de ligne. (b) Comparaison entre calculs de tension de ligne à l'échelle du micron et données expérimentales correspondant à l'extrapolation à température nulle des contraintes critiques mesurées sur des monocristaux par Parkhomenko et Pustovalov [13]. Les variations de la tension de ligne et du couplage des dislocations partielles en fonction de la taille du système sont modélisées par la théorie élastique.

La méthode de calcul de la contrainte d'écoulement est la même que dans le cas des simulations atomistiques. Les résultats obtenus à partir du modèle de TL montrent que le DSS ne peut être décrit qu'à la condition de prendre en compte la dissociation des dislocations et la nature différente des obstacles rencontrés par la dislocation. En effet, cette modélisation reproduit quantitativement la contrainte d'écoulement calculée par les simulations atomistiques pour une dislocation coin dans les deux alliages de Ni(Al) et Al(Mg) comme reporté sur la figure 4a. Dans une solution solide concentrée, c'est le détail atomique de l'interaction non-linéaire obstacle-dislocation dissociée qui explique le DSS [12].

Ce modèle nous permet en outre d'étudier l'influence de certains paramètres physiques sur la contrainte d'écoulement calculée. Nous avons ainsi pu démontrer une hypothèse classique formulée par Nabarro selon laquelle les obstacles situés au-delà de quelques plans interatomiques (typiquement quatre) au-dessus ou en dessous du plan de glissement sont négligeables dans le DSS.

Grace au coût de calcul réduit du modèle de ligne élastique, nous montrons finalement un accord remarquable entre les résultats du modèle de TL pour un système de taille micrométrique et les résultats expérimentaux disponibles pour une dislocation coin dans l'alliage de Al(Mg) [12-13] (figure 4b). Ce dernier résultat mérite néanmoins d'être relativisé du fait de la grande dépendance des résultats vis-à-vis du potentiel empirique utilisé pour ajuster les paramètres physiques du modèle de TL. La démarche mutli-échelle proposée dans ce travail permettant de reproduire quantitativement les simulations atomistiques par un modèle de TL reste quant à elle valide. Le modèle de TL pourra ainsi être ajusté sur un modèle atomique plus précis que les potentiels empiriques EAM, comme des calculs de premier principe [14].

5 Conclusion

Ces travaux améliorent la description théorique du durcissement par solution solide des métaux cubiques à faces centrées aux basses températures. Nous avons notamment mis en évidence quatre résultats principaux concernant ce phénomène physique:

- l'identification des origines physiques de l'intensité et de la portée d'interaction entre une dislocation et un atome de soluté;
- un durcissement analogue des segments de dislocation coin et vis;
- le rôle des clusters d'impuretés et de la dissociation des dislocations dans le durcissement;
- le durcissement négligeable des solutés situés au-delà de quelques plans interatomiques du plan de glissement de la dislocation (validation de l'hypothèse de Nabarro);

A la condition de pouvoir calculer plus quantitativement l'interaction dislocation-soluté à l'échelle atomique, comme par exemple dans le cas de calcul *ab-initio* [14], la démarche proposée permet d'envisager, à terme, une description précise du durcissement par solution solide.

References

- [1] Haasen P., dans *Dislocations in Solids*, Volume 4. North-Holland, Amsterdam, 1979.
- [2] Bacon D.J., Y.N. Osetsky, et D. Rodney, dans *Dislocations in Solids*, Volume 15, Elsevier, 2009.
- [3] Proville, L., D. Rodney, Y. Brechet, et G. Martin, *Atomic-Scale Study of Dislocation Glide in a Model Solid Solution*, *Phil. Mag.*, 86, 3893, 2006.
- [4] Rodary, E., D. Rodney, L. Proville, Y. Bréchet, et G. Martin, *Dislocation Glide in Model Ni(Al) Solid Solutions by Molecular Dynamics*, *Phys. Rev. B*, 70, 054111, 2004.
- [5] Liu, X.-Y., P. P. Ohotnicky, J. B. Adams, C. Lane Rohrer, et R. W. Hyland, *Anisotropic Surface Segregation in Al-Mg Alloys*, *Surf. Sci.*, 373, 357, 1997.
- [6] Rodney, D., et G. Martin, *Dislocation Pinning by Small Interstitial Loops: A Molecular Dynamics Study*, *Phys. Rev. Lett.*, 82, 3272, 1999.
- [7] Bitzek E., P. Koskinen, F. Gähler, M. Moseler, et P. Gumbsch, *Structural Relaxation Made Simple*, *Phys. Rev. Lett.*, 97, 170201, 2006.
- [8] Patinet, S., et L. Proville, *Dislocation Pinning by Substitutional Impurities in an Atomic-Scale Model for Al(Mg) Solid Solutions*, *Phil. Mag.*, 1, 2011.
- [9] Patinet S., et L. Proville, *Depinning Transition for a Screw Dislocation in a Model Solid Solution*, *Phys. Rev. B*, 78, 104109, 2008.
- [10] Friedel J., *Dislocations*, Oxford, Pergamon, 1964.
- [11] Nabarro F. R. N., *The Theory of Solution Hardening*, *Phil. Mag.*, 35, 613, 1977.
- [12] Proville L., et S. Patinet, *Atomic-Scale Models for Hardening in Fcc Solid Solutions*, *Phys. Rev. B*, 82, 054115, 2010.
- [13] Parkhomenko T. A., et V. V. Pustovalov, *The Low-Temperature Yield Stress Anomaly in Metals and Alloys*, *Phys. Stat. Sol. (a)*, 74, 11, 1982.
- [14] Leyson, G. P. M., W. A. Curtin, L. G. Hector, et C. F. Woodward, *Quantitative Prediction of Solute Strengthening in Aluminium Alloys*, *Nat. Mater.*, 9, 750, 2010.