

# Modélisation atomistique de l'ancrage des dislocations dans les aciers Fe-C

Arnaud Allera<sup>1\*</sup>, Fabienne Ribeiro<sup>2</sup>, Michel Perez<sup>3</sup>, David Rodney<sup>1</sup>

\* arnaud.allera@univ-lyon1.fr

<sup>1</sup> Université de Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS, Institut Lumière Matière, F-69622, VILLEURBANNE, FR

<sup>2</sup> IRSN/PSN-RES/SEMIA/LSMA, Centre d'études de Cadarache, 13115, Saint Paul-lez-Durance, FR

<sup>3</sup> Université de Lyon, INSA de Lyon, MATEIS, UMR CNRS 5510, Villeurbanne, FR



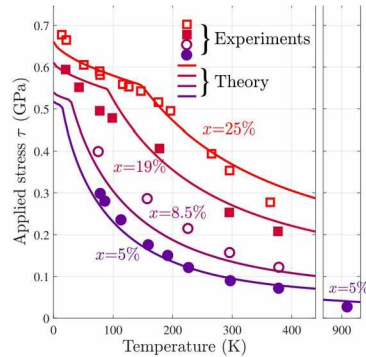
Université Claude Bernard



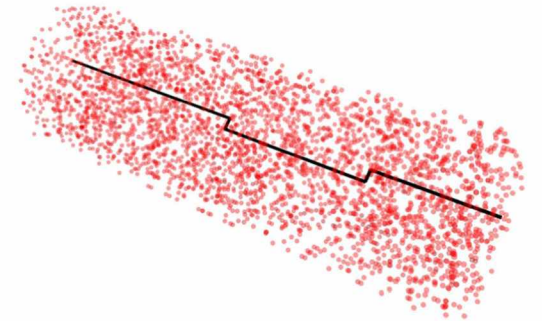
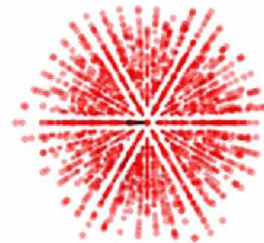
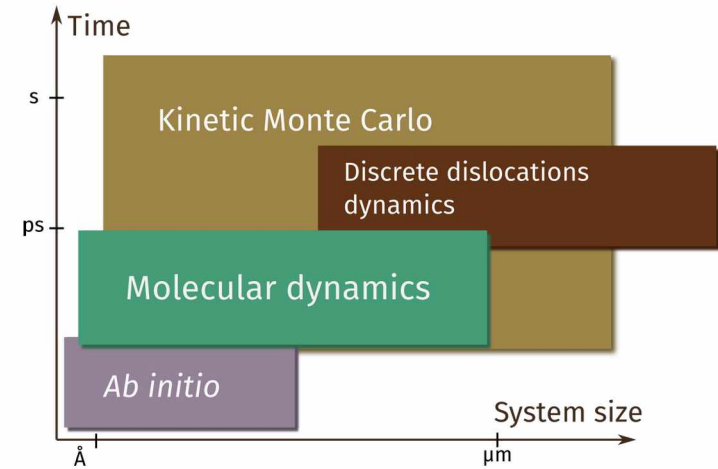
INSTITUT NATIONAL  
DES SCIENCES  
APPLIQUÉES  
LYON

# Contexte

- Plasticité des alliages c.c. **substitutionnels** bien comprise, modèles quantitatifs
- Encore des **difficultés** pour les c.c. **interstitiels** (énergies de liaison élevée, diffusion rapide)
- **Simulations atomistiques** pour relier *ab initio* et échelles supérieures



Effet de la température sur la limite élastique dans Nb-Mo à haute entropie (Maresca, Curtin, 2020)



Modèle Monte Carlo cinétique d'une dislocation vis dans un alliage substitutionnel W-Re (Zhao, Marian, 2018)

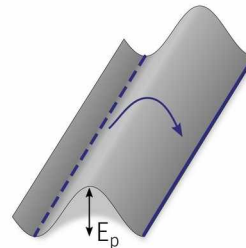
# Potentiel interatomique Fe-C

Critères principaux :

- **Plasticité** (barrière de Peierls, coeur compact, plan de glissement)
- **Propriétés d'alliage** (sites interstitiels, reconstruction de coeur)

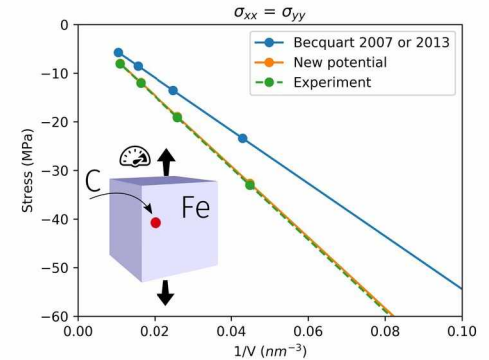
Approche :

- **10 potentiels Fe/Fe-C testés**
- **Hybridation** des deux plus satisfaisants  
(Becquart 2007, Proville 2012)
- **Meilleur accord** avec les données *ab initio* de référence

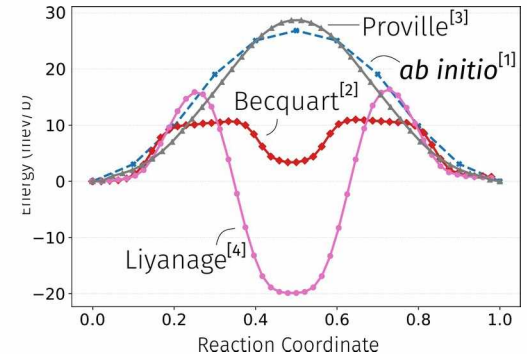


## Quelques propriétés

Tenseur d'élastodiffusion



Barrière de Peierls



[1] Ventelon et al., Acta. Mat. (2013)

[2] Becquart et al., CMS, (2007)

[3] Proville et al. Nat. Mat. (2012)

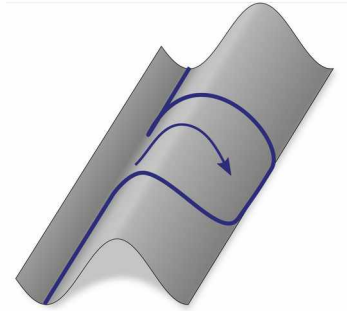
[4] Liyanage et al., PRB, (2014)

[5] Schultz, Mat. Sci. Eng. (1968)

[6] Lüthi, PhD Thesis, (2017)

# Glissement thermiquement activé dans Fe

- Mécanisme de plasticité à basse température: formation de **paires de décrochements**
- Approche stochastique basée sur la Théorie de l'État de Transition (ou TST) à  $\dot{\gamma}$  imposé:



probabilité de saut :

$$p(\tau) = \nu \exp\left[-\frac{G(T, \tau)}{kT}\right]$$

probabilité de survie au temps t :

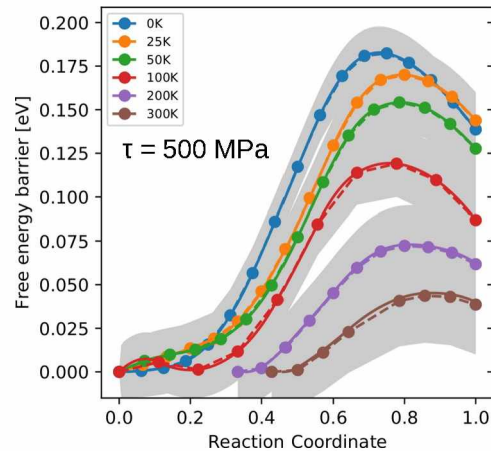
$$W(t) = \exp\left(-\int_0^t p(\dot{\tau}_0 u)\right) du$$

→ on déduit un flow stress  
(où cette probabilité chute)

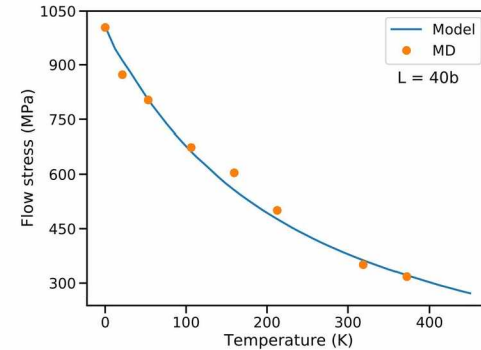
Calcul direct de  $G(T, \tau)$  : code PAFI



Swinburne, Marinica, PRL, 2018



Résultat (domaine harmonique)

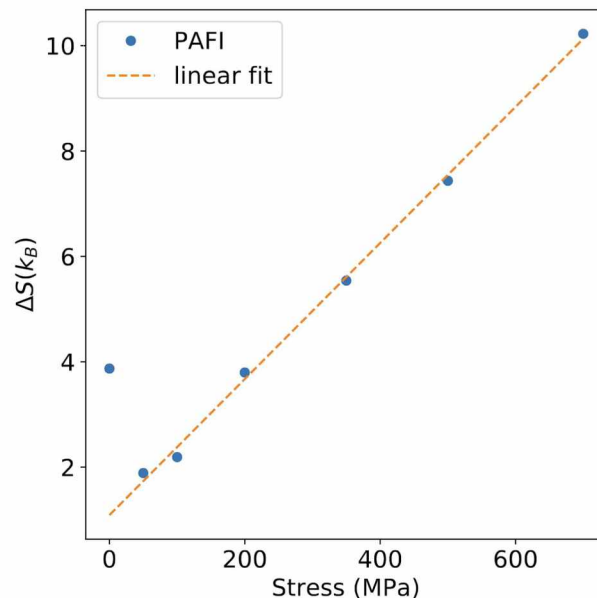
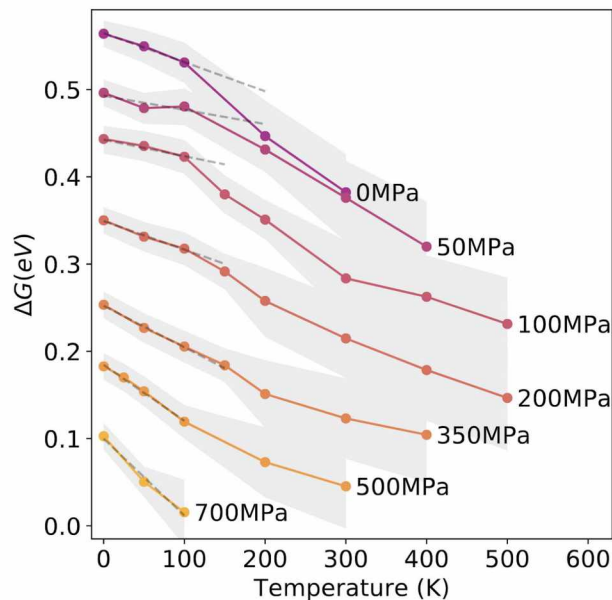
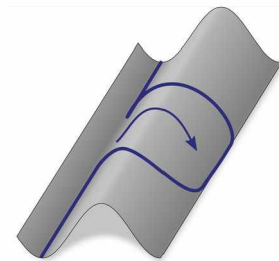


Accord avec simulations DM  
Et aux grandes T, petits  $\dot{\gamma}$  ?

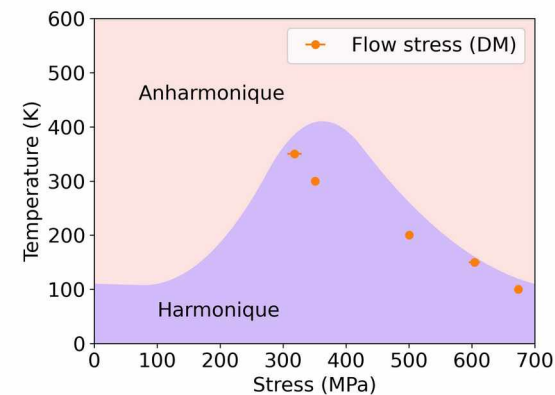
# Au delà de l'hypothèse harmonique

Collaboration avec Tom Swinburne, CINAM

- Calcul de  $G$  dans un large domaine de température-contrainte
- $\Delta S$  linéaire en contrainte dans le domaine harmonique (confirmé par DM)
- Vers un rapprochement avec conditions expérimentales ( $\dot{\gamma}, T$ )

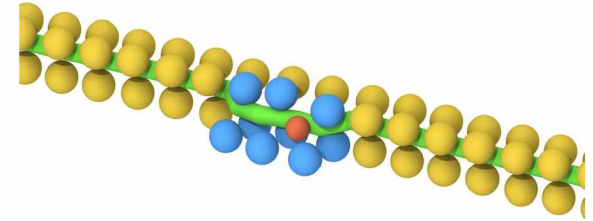


Domaine de validité estimé de l'hypothèse harmonique

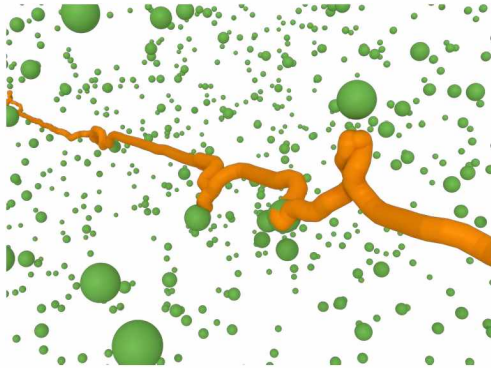


# Mobilité des dislocations dans une solution solide de C

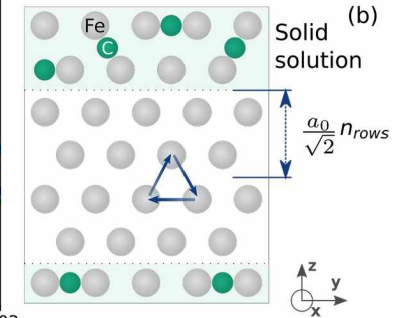
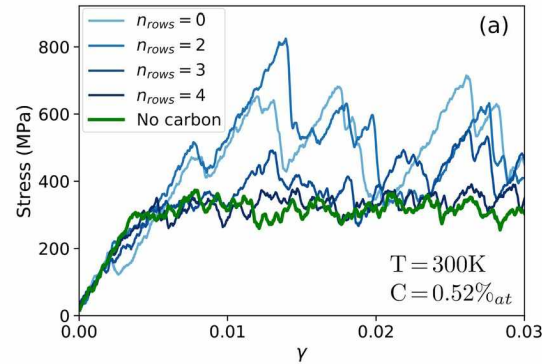
- Environnement complexe (structure 3D de la ligne)
- Fort ancrage par les solutés (chutes de contrainte)
- Interactions à courte portée prépondérantes



Coeur reconstruit conforme aux données *ab initio*

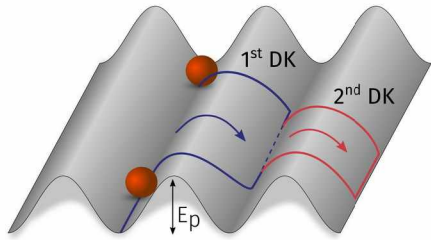


Ligne de dislocation interagissant avec une solution solide de carbone



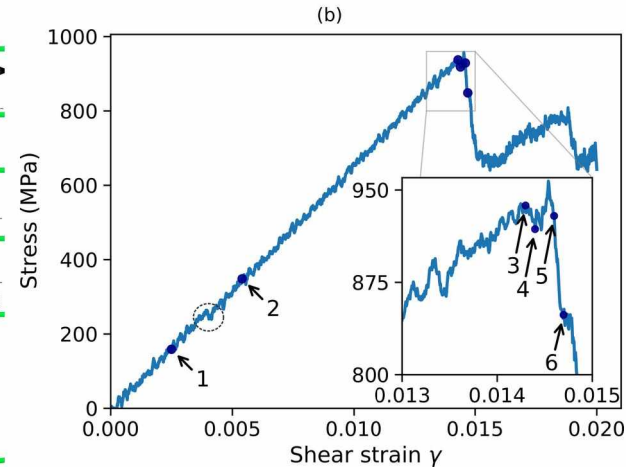
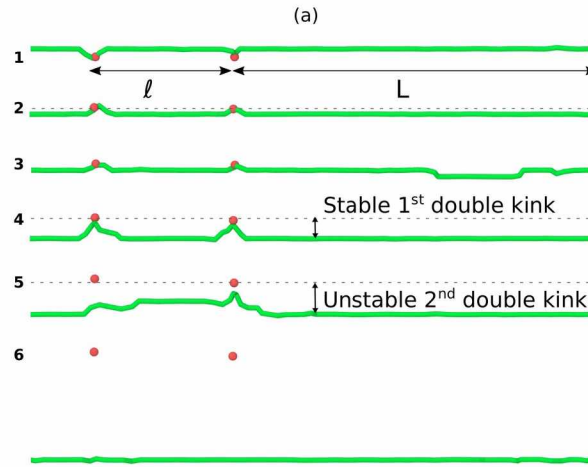
Effet de la largeur de la zone sans carbone autour du plan de glissement

# Mode de désancrage des dislocations



Deux barrières consécutives pour désancrer la dislocation

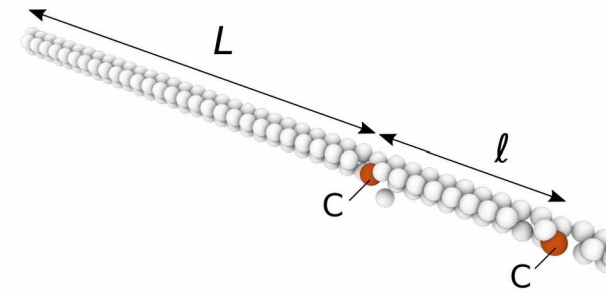
- Fort effet attractif qui stabilise le premier décrochement
- Explique le fort effet durcissant du C



Désancrage d'une dislocation décorée de deux C, et courbe contrainte-déformation associée

## Effet de l'espacement des solutés

- Fort effet de longueur de segment (inattendu dans un c.c.)
- Comportement type "maillon faible" si plusieurs longueurs ( $L > l$ )
- Modification du modèle probabiliste



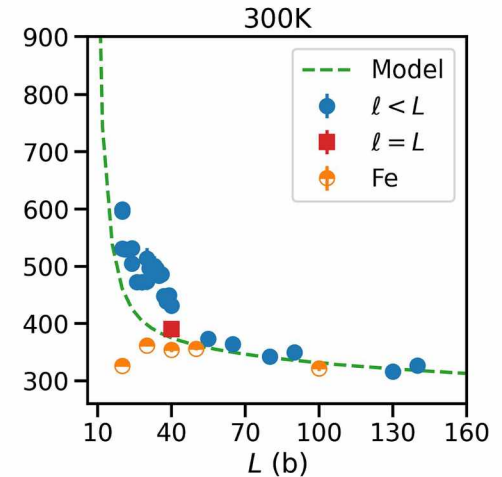
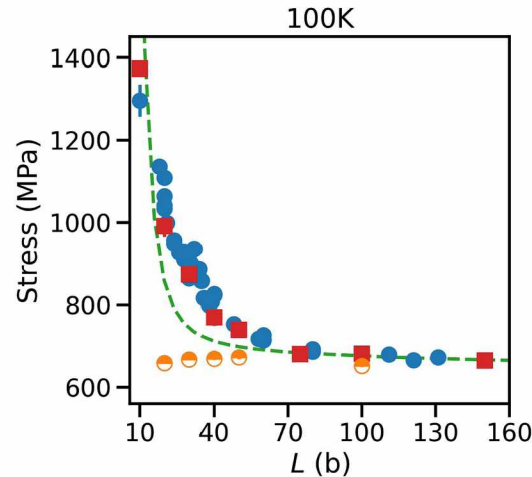
Pour chaque barrière (hypothèse harmonique)

$$p_{i,L}(\tau) = \nu e^{S_0 \sigma} e^{-\frac{H_{i,L}(\tau)}{kT}}$$

Probabilité de survie à  $t$  si 1<sup>er</sup> saut à  $t^*$  :

$$W(t) = W_1(t) + W_1(t^*)W_2(t - t^*)$$

## Effet de la longueur de segment





# Conclusion et perspectives

- Nouveau potentiel Fe-C (publication à venir)
- Deux changements d'échelle effectués
- Modèle de durcissement par le carbone

## Perspectives

- Rapprochement avec conditions expérimentales (TST)
- Prise en compte de populations de solutés (en solution ou atmosphère) et de leur diffusion (collab. Jaime Marian, UCLA)

