

# La déformation plastique des matériaux en mode virtuel

Les simulations atomistiques complètent aujourd'hui les études expérimentales des mécanismes de déformation des matériaux.

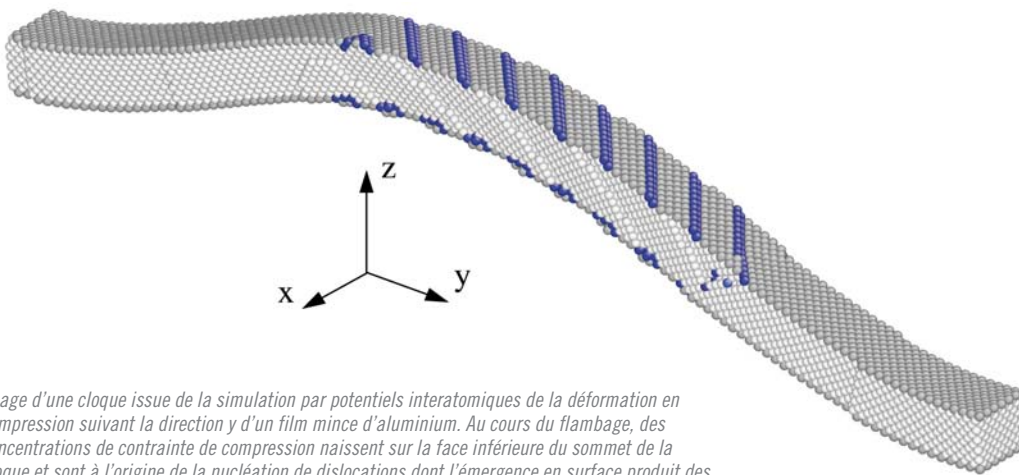


Image d'une cloque issue de la simulation par potentiels interatomiques de la déformation en compression suivant la direction y d'un film mince d'aluminium. Au cours du flambage, des concentrations de contrainte de compression naissent sur la face inférieure du sommet de la cloque et sont à l'origine de la nucléation de dislocations dont l'émergence en surface produit des marches (atomes en bleu).

Un matériau soumis à une contrainte mécanique se déforme généralement de façon élastique jusqu'à un certain point. Au-delà, la déformation devient plastique; le matériau ne revient pas dans son état initial si on relâche la contrainte. La détermination de ce seuil ainsi que des changements irréversibles induits dans le stade plastique est primordiale pour la compréhension et l'amélioration de la tenue mécanique des matériaux de structure. Pour un matériau cristallin massif, le stade plastique débute généralement avec l'activation des dislocations, des défauts singuliers très efficaces pour relaxer les contraintes subies. On peut observer divers mécanismes, tels que la formation et la mise en mouvement des dislocations, puis leur interaction entre elles et avec la microstructure du matériau. La déformation plastique est par essence multi-échelle, car le comportement macroscopique du matériau va fortement dépendre des propriétés collectives des dislocations à l'échelle mésoscopique\*, mais également de leurs caractéristiques individuelles à l'échelle nanométrique. Pour

mieux comprendre la déformation plastique des matériaux, il est donc nécessaire de déterminer les mécanismes élémentaires gouvernant la formation et la mobilité d'une dislocation unique. Cependant obtenir ces informations à partir d'expériences est une tâche très difficile et le fait que les dislocations apparaissent rarement isolées constitue un obstacle supplémentaire.

## Principe et domaine d'utilisation des simulations atomistiques

Il est possible de remédier partiellement à ce problème par l'utilisation de simulations atomistiques. Ce type de calculs numériques connaît un formidable essor depuis une quinzaine d'années environ, grâce à l'augmentation régulière de la puissance de calcul et au développement de codes libres. Le principe en est relativement simple: on simule le comportement de la matière en fonction de conditions thermodynamiques données (température, pression, etc.) en calculant les déplacements de chaque atome au cours du temps. Ceci suppose la description des interactions

inter-atomiques, laquelle est généralement effectuée de deux façons: soit à partir d'un potentiel analytique ou numérique ajusté pour reproduire certaines propriétés du matériau choisi, soit à partir de la structure électronique calculée. La première approche permet actuellement de simuler des systèmes comprenant jusqu'à plusieurs millions d'atomes, ce qui équivaut environ à un cube de matière de quelques dizaines de nanomètres de côté. La précision obtenue n'est toutefois pas toujours satisfaisante. La seconde approche donne de meilleurs résultats, mais requiert une puissance de calcul bien supérieure qui limite les simulations à des systèmes de l'ordre de quelques centaines d'atomes. Malgré les limitations, ces deux approches complémentaires permettent d'étudier des configurations de plus en plus réalistes.

## De nombreuses applications possibles

Des simulations atomistiques sont réalisées au sein du Département de Physique et de Mécanique des Matériaux de l'Institut P' (UPR CNRS) afin de déterminer le comportement sous contraintes de systèmes de taille nanométrique et les propriétés de dislocations individuelles. Par exemple, des travaux sont actuellement menés afin d'analyser la réponse sous contrainte de films minces supportés, qui sont largement utilisés dans des domaines variés tels que la micro-électronique. À cause de contraintes accumulées au cours de l'élaboration, des structures de cloques issues d'une décohésion et du flambage du film peuvent apparaître. Des simulations en dynamique moléculaire ont permis de montrer que des événements plastiques pouvaient survenir dans un film flambé d'aluminium et que, dans

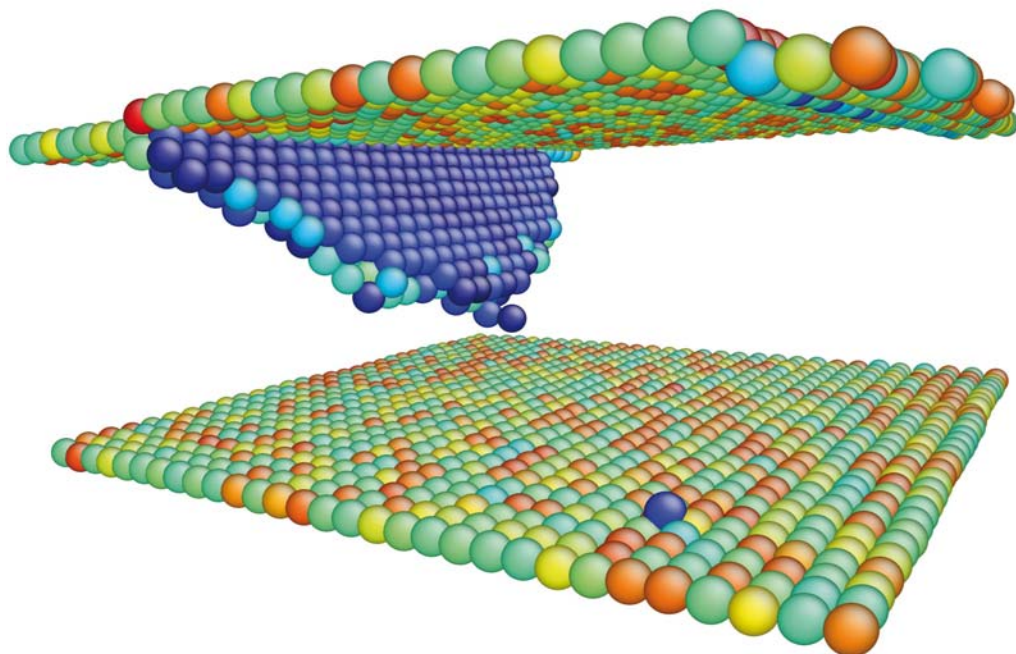
\* Échelle intermédiaire entre les échelles microscopique et macroscopique.

ce cas, les modèles élastiques des milieux continus souvent utilisés étaient alors insuffisants pour décrire correctement ce phénomène à l'échelle nanométrique.

L'analyse fine de l'apparition des événements plastiques montre que ces derniers sont en fait associés à la nucléation et à la propagation de dislocations à partir des surfaces. De tels processus deviennent prépondérants pour des systèmes de taille nanométrique, où le rapport surface/volume n'est plus négligeable. La caractérisation complète du mécanisme de nucléation est donc souhaitable. Grâce à des simulations atomistiques, il a été possible de suivre au cours du temps les différents stades de la formation d'une boucle de dislocation à partir d'une surface dans le cas d'un matériau métallique sous contrainte. D'un point de vue prédictif, la possibilité de faire varier facilement la température, la contrainte et la géométrie de la surface dans les simulations nous permet de déterminer dans quelles conditions la formation d'une dislocation devient favorable.

En plus de la capacité à reproduire de façon réaliste la dynamique d'un système, les simulations atomistiques sont également utiles pour déterminer des quantités intrinsèques d'un matériau qui sont quasiment inaccessibles par l'expérience. On peut citer comme exemples les résistances maximales au cisaillement ou en traction d'un matériau parfait, c'est-à-dire ne contenant aucune impuretés ni défauts de structure. De telles quantités peuvent être obtenues avec une grande précision par la réalisation de simulations atomistiques où les forces entre atomes sont calculées à partir de la structure électronique. Dans le cas d'un matériau covalent comme le silicium, où la cohésion est assurée par des liaisons atomiques fortes et directionnelles, nous avons ainsi pu déterminer que le cisaillement maximum avant rupture était de l'ordre de 24 %, soit une résistance maximale au cisaillement de 8 GPa.

Les simulations atomistiques sont donc un complément intéressant à l'expé-



Formation d'une boucle de dislocation (sphères de couleur bleue) à partir d'une surface d'aluminium, obtenue à partir de calculs de dynamique moléculaire. Seuls les atomes dans un environnement différent du système massif sont représentés.

rience pour l'étude de la déformation plastique des matériaux. L'augmentation des performances des moyens de calculs devrait permettre de simuler dans le futur des configurations de plus en plus réalistes, plus proches des systèmes expérimentaux. ■

#### Contacts:

Laurent PIZZAGALI

Laurent.Pizzagalli@univ-poitiers.fr

Sandrine BROCHARD

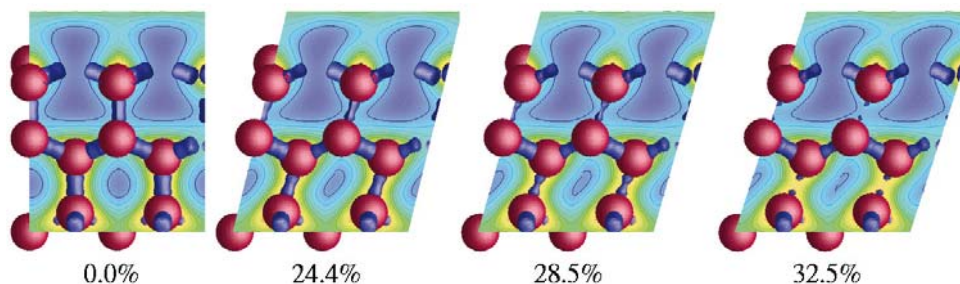
Sandrine.Brochard@univ-poitiers.fr

Julien GODET

Julien.Godet@univ-poitiers.fr

Julien DURINCK

Julien.Durinck@univ-poitiers.fr



Variation de la densité électronique (du plus faible au plus intense, du bleu au jaune) au cours du cisaillement du silicium (sphères rouges et liaisons entre atomes en bleu foncé), déterminée par un calcul de structure électronique réalisé avec la théorie de la fonctionnelle de la densité. Pour les forts cisaillements, on observe un affaiblissement de certaines liaisons entre atomes.