

Sujet de thèse 2024 sur concours contrat doctoral UL

Ecole doctorale C2MP

Spécialité : *Mécanique des matériaux*

Approches multi-échelles pour modéliser le glissement dévié et ses conséquences sur l'effet Bauschinger

Les propriétés mécaniques, physiques et chimiques des polycristaux métalliques sont fortement influencées par les solutés et par les longueurs internes ainsi que par les mécanismes de plasticité cristalline, notamment les interactions mutuelles entre les dislocations, les joints de grains et les macles (ou les joints de phase). Malgré l'effort scientifique, il n'est toujours pas si aisé de comprendre les sources effectives de certains de ces effets, en particulier l'effet Bauschinger dans les polycristaux et les alliages multiphasés qui est la signature macroscopique de contraintes à longue distance induite dans la microstructure. Des théories avancées, comme la mécanique de champs de dislocations [1] et la plasticité à gradient [2], ont permis d'établir un lien entre ce dernier effet et les empilements de dislocations en micro-plasticité (dislocations géométriquement nécessaires, GNDs). Cependant, cela reste à approfondir car il a été montré que les GNDs peuvent aussi avoir un effet dissipatif (contribution à l'érouissage isotrope) [8]. L'objectif de cette thèse est d'enrichir et de faire dialoguer plusieurs approches avancées à petites échelles pour mieux comprendre les effets de taille sur les propriétés mécaniques des polycristaux métalliques.

Une extension de la méthode MDFM-EVPFFT, récemment développée et appliquée dans l'équipe encadrante [4,5], avec la prise en compte des énergies de défauts dans la formulation non locale sera proposée. Cela permettra de reformuler la contrainte cinématique émanant de la théorie pour mieux décrire l'effet Bauschinger. Plusieurs choix seront discutés en comparaison avec des approches discrètes (DDD) ou à gradients actuelles [3,9]. Une implémentation dans un formalisme en grandes transformations sera réalisée pour étudier l'évolution des densités de GNDs, leur auto-organisation, l'apparition et la propagation des bandes de glissement et des bandes en genoux sous chargements complexes.

Nous nous intéresserons également à la prise en compte du glissement dévié dans la formulation MDFM-EVPFFT en l'intégrant au niveau des équations de transport de densités de GNDs sur les systèmes de glissement. Nous étudierons notamment son influence sur l'effet Bauschinger pour améliorer les modèles à champs moyens et nous l'appliquerons sur des alliages HEA (à haute entropie) [6] et des aciers avec des effets de solution solide ont été reportés (Fe. 8%Al) [7] où il a été montré que le glissement dévié est le point central pour décrire l'érouissage isotrope et cinématique ainsi que pour comprendre la structure des dislocations (glissement planaire ou formation de cellules). Les modèles champs complets (MDFM-EVPFFT, à gradients) seront utilisés pour alimenter/valider les modèles à champs moyens nettement plus rapides en temps de calculs (modèles « on-line »).

En parallèle de ces approches théoriques, une démarche expérimentale sera développée. Elle consistera à étudier l'érouissage et l'effet Bauschinger dans des alliages de type Cu-Si et Cu-Al dont une littérature existe [10-12]. Ces alliages présentent différentes énergies de faute d'empilement qui dépendent fortement de la concentration en éléments d'addition (Al ou Si par exemple).

Références

- [1] Arora, R., Acharya, A., 2020. Dislocation pattern formation in finite deformation crystal plasticity. *International Journal of Solids and Structures* 184, 114-135.
- [2] Gurtin, M.E., 2002. A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 50, 5-32.
- [3] Jebahi, M., Cai, L., Abed-Meraim, F., 2020. Strain gradient crystal plasticity model based on generalized non-quadratic defect energy and uncoupled dissipation. *International Journal of Plasticity* 126, 102617.
- [4] Djaka, K.S., Berbenni, S., Taupin, V., Lebensohn, R.A., 2020. A FFT-based numerical implementation of mesoscale field dislocation mechanics: application to two-phase laminates. *International Journal of Solids and Structures* 184, 136-152.
- [5] Berbenni, S., Taupin, V., Lebensohn, R.A., 2020. A fast Fourier transform-based mesoscale field dislocation mechanics study of grain size effects and reversible plasticity in polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 135, 103808
- [6] Bouaziz, O., Moon, J., Kim, H.S., Estrin, Y., 2021. Isotropic and kinematic hardening of a high entropy alloy. *Scripta Materialia* 191, 107-110.
- [7] Bouaziz, O., Barbier, D., Embury, J.D., Badinier, G., 2013. An extension of the Kocks-Mecking model of work hardening to include kinematic hardening and its application to solutes in ferrite. *Philosophical Magazine* 93, 247-255.
- [8] Fleck, N.A., Willis, J.R., 2009. A mathematical basis for strain-gradient plasticity theory. Part I: Scalar plastic multiplier. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 57, 161-177.
- [9] Jebahi, M., Forest S., 2023. An alternative way to describe thermodynamically-consistent higher-order dissipation within strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 170, 105103
- [10] Howie, A., Swann, P.R. 1961. Direct measurements of stacking-fault energies from observations of dislocation nodes *Philosophical Magazine* 6 (70) 1215-1226.
- [11] Ruff, A.W., 1970. Measurement of stacking fault energy from dislocation interactions. *Metallurgical Transactions* 6 (70) 2391-2413.
- [12] Pande, C.S., 1970. Stacking Fault Energies of alpha-Cu-Al Alloys. *Phys. stat. sol.* 37, 151-157.

L'équipe

Vos Compétences

Requises : Très bonnes connaissances en **Science des Matériaux et en Mécanique des solides**. À l'aise avec le travail sur ordinateurs (programmation, scripts, lignes de commande ..).

Souhaitées : Connaissances en langage Python, Matlab, Fortran 2003, C/C++, etc. Un plus serait des connaissances déjà acquises en plasticité des matériaux cristallins, en théorie des dislocations et/ou en lois de comportements mécaniques pour les métaux/alliages (relations microstructures / propriétés mécaniques)

Nous offrons

Environnement national et international dynamique. Collaborations envisagées avec Los Alamos National Lab. sur les méthodes micromécaniques à base de FFT (USA), SIMAP pour la DDD.

Expertise de l'encadrement (compétences en simulation numérique et modélisations micromécaniques, relations microstructures /comportement, aciers, alliages HEA, mécanismes physiques de la plasticité, champs complets/champs moyens, lois d'érouissage en plasticité).

Développement de compétences numériques de pointe (calcul haute performance, calcul parallèle, cluster Linux, programmation).

Encadrement :

Olivier BOUAZIZ, Professeur Université de Lorraine, olivier.bouaziz@univ-lorraine.fr (directeur de thèse)
Stéphane BERBENNI, Directeur de recherche CNRS, stephane.berbenni@univ-lorraine.fr (co-directeur)
Mohamed JEBAHI, Maître de Conférence ENSAM, mohamed.jebahi@ensam.eu (co-encadrant)
Vincent TAUPIN, Chargé de recherche CNRS, HDR, vincent.taupin@univ-lorraine.fr (co-encadrant)

Axes de recherches concernés au laboratoire LEM3 :

La recherche sera menée principalement dans le Département Ingénierie des Microstructures, Procédés, Anisotropie, Comportement (IMPACT) du LEM3 et plus particulièrement dans l'axe 2 (MAPLI) en interaction avec le département 1 (axe MENU). L'axe de recherche MAPLI travaille sur la mise en évidence des relations entre l'organisation collective des défauts cristallins, les longueurs internes associées et les propriétés mécaniques, des développements théoriques (théorie continue des défauts, micromécanique, homogénéisation) et des méthodes expérimentales (couplage extensométrie et EA, nano-indentation) et numériques (atomistique, méthodes spectrales) novatrices. L'axe MENU travaille sur la mise en œuvre numérique de théories à gradients en grandes transformations. L'équipe travaille à différentes échelles de l'atome jusqu'à l'agrégat polycristallin. L'équipe publie régulièrement dans des journaux scientifiques de référence dans le domaine de la mécanique des matériaux: *Acta Materialia*, *Scripta Materialia*, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, *Int. Journal of Plasticity*, *Int. Journal of Solids and Structures*.

Le laboratoire LEM3 :

Le Laboratoire d'Étude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3) est un centre de recherche multidisciplinaire situé à Metz, combinant mécanique des solides, métallurgie, ainsi que science, chimie et physique des matériaux. L'excellence scientifique du LEM3 est reconnue internationalement et par la co-tutelle de l'Université de Lorraine, du CNRS et des Arts & Métiers (UMR CNRS 7239). Le LEM3 est membre de l'institut Carnot ARTS, du laboratoire d'excellence (LabEx) DAMAS et emploie environ 250 personnes dont 150 permanents.