Effet de taille dans les polycristaux à grains ultra-fins

L'objectif de cet exercice est de donner une interprétation de l'influence de la taille de grain sur le durcissement plastique des matériaux polycristallins à petite taille de grains et à température ordinaire. Pour les applications numériques, on prendra $b = 0.25$ nm, $\mu = 50$ GPa.

1) On suppose que les grains d'un polycristal contiennent une densité de dislocations ρ, distribuer de manière homogène. Montrer que la distance moyenne entre dislocations stockées est de la forme : $d = \kappa/\sqrt{\rho}$ et justifiez une valeur du coefficient numérique κ. (pour obtenir ce résultat, on pourra par exemple supposer que les dislocations sont parallèles et forment un réseau régulier.)

$d = 1/\sqrt{\rho}$ *et* $\kappa \approx 1$

2) Les dislocations se déplacent par glissement sous l'effet d'une contrainte projeté τ. Le plan de glissement des dislocations est coupé par une densité (forêt) de dislocations sécantes $\rho_f \approx \rho$. On suppose que ces dislocations forêt agissent comme des points d'ancrage qui bloquent le mouvement des dislocations. Monter en utilisant l'approximation de la tension de ligne que la contrainte nécessaire pour franchir la densité de dislocation sécante est :

$$\tau = \alpha\mu b\sqrt{\rho}$$

avec α un coefficient numérique dont on donnera une valeur approximative.

A l'aide de la définition de la tension de ligne, on trouve si une dislocation mobile est accrochée sur tous les arbres de la forêt!
$\tau = C\frac{\mu b}{R} = 2C\frac{\mu b}{d} = \alpha\mu b\sqrt{\rho}$ *avec* $\alpha = 2C$
Expérimentalement $\alpha \approx 0.35$*, car une dislocation n'est ancrée que par une fraction des arbres de la forêt.*

3) Au cours de la déformation plastique, Les dislocations mobiles se déplacent en moyenne d'une distance Λ avant d'être immobilisées par suffisamment de dislocations forêt. Λ est appelé le libre parcours moyen des dislocations. Ainsi, si une densité de dislocations mobiles ρ_m se déplace d'une distance dx, la fraction de dislocations bloquées est de:

$$d\rho = \rho_m(dx/\Lambda)$$

Justifiez sans calcul pourquoi le libre parcourt moyen Λ est proportionnel à $1/\sqrt{\rho}$ (on pourra faire référence à la distance moyenne entre dislocations définie en 1.)

On écrira dans la suite

$$\Lambda = \beta/\sqrt{\rho}$$

Les dislocations sont bloquées par la formation de jonctions. L'espacement entre jonction est nécessairement proportionnel à l'espacement entre dislocations.

Dans les polycristaux à petits grains, cette équation est généralement remplacée par

$$\Lambda \approx D$$

avec D la taille moyenne des grains. Justifier cette seconde équation.

Si $D \approx d$, alors les joints de grains sont des barrières plus forte au glissement des dislocations et $\Lambda \approx D$

4) On considère des grains cubiques de dimensions L_x, L_y et L_z. Les dislocations supposées toutes de caractère coin et de vecteur de Burgers $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_x$, glissent dans le plan $(x0y)$ dans la direction $\mathbf{e}_x$. Quelle est le cisaillement plastique associée à un déplacement dx d'une dislocation dans le grain (on supposera ici que le grain est libre de ce déformer aux limites, c'est à dire que les grains voisins n'influencent pas la déformation du grain).

$d\gamma = \frac{b}{L_z}\frac{dx}{L_y}$

5) Déduire de la question précédente que les déplacements dx d'une densité de dislocations mobiles ρ_m conduisent à un cisaillement plastique du grain de

$$d\gamma_p = \rho_m b dx$$

$d\gamma = n\frac{L_x}{L_x}\frac{b}{L_z}\frac{dx}{L_y} = \rho_m b dx$

6) Déduire de l'ensemble des questions précédentes que la contrainte τ, caractérisant la mise en mouvement des dislocations mobiles dans des grains de grandes dimensions, évolue avec la déformation plastique ϵ_p selon :

$$\frac{d\tau}{d\gamma_p} = \frac{\alpha\mu}{\beta}$$

Quelle forme prendra cette même équation dans des polycristaux à petites tailles de grain ?

$d\tau = \alpha\mu b\frac{d\rho}{\sqrt{\rho}}$
$d\gamma = \rho_m b dx$

a) $\theta = \frac{d\tau}{d\gamma} = \frac{\alpha\mu b d\sqrt{\rho}}{\rho_m b\sqrt{\rho} dx} = \frac{\alpha\mu}{\sqrt{\rho}\Lambda} = \frac{\alpha\mu}{\beta}$
b)$\theta = \frac{d\tau}{d\gamma} = \frac{\alpha\mu}{\sqrt{\rho}D}$

7) Le taux de durcissement plastique dans chaque grain est défini par la quantité $\theta = \frac{d\tau}{d\epsilon_p}$. Selon le modèle développé précédemment, comment évolue ce taux de durcissement avec la densité de dislocation ρ et la taille de grain D?

Comment s'appelle le phénomène observé dans le cas d'une réduction de la taille de grain D ?

θ increase with decreasing size of D at given dislocation density
θ decrease with increasing dislocation density at given size of grains
This property is related to the Hall-Petch effect.

8) Finalement, calculer la reduction de taille de grain qu'il faut opérer sur un polycristal pour augmenter sa limite élastique initiale par un facteur 2.

$\tau = \frac{\alpha\mu\gamma}{\sqrt{\rho}D}$
$\tau = \sqrt{\frac{(\alpha\mu)^2 b\gamma}{D}}$
Hence, if we want to increase τ by a factor 2 the grains size must be decreased by a factor 4.

Size effect in polycrystal with ultrafine grains

With this exercise we want to justify the influence of grain size on the plastic deformation of polycrystal materials with small grain size and at room temperature. Calculations will be made considering $b = 0.25$ nm and $\mu = 50$ GPa.

1) We suppose that the density of dislocations ρ in grains is homogeneously distributed. Show that the mean distance between dislocations in the grains takes the form: $d = \kappa/\sqrt{\rho}$ and justify the usual value given to the coefficient κ. (For simplicity, we can assume that dislocations are parallel and formed a regular pattern.)

2) Mobile dislocations glide as a result of a resolved shear stress τ. The glide plane of mobile dislocations is cut by a density $\rho_f \approx \rho$ of immobile (forest) dislocations. We assume that the latter forest dislocations are strong pinning points in the glide plane and limit the displacement of dislocations. With the help of the line tension approximation show that the resolved shear stress needed to move dislocations by glide in their glide plane take the form:

$$\tau = \alpha\mu b\sqrt{\rho}$$

where α is the forest coefficient. Estimate the value of α.

3) During plastic deformation, mobile dislocations in average glide a distance Λ before they are stopped by forest dislocations. Λ is defined as the mean free path of dislocations. Then, If a mobile dislocation density ρ_m glide a distance increment dx, the fraction of dislocation immobilized take the form

$$d\rho = \rho_m(dx/\Lambda)$$

Justify without calculation why the dislocation mean free path Λ is proportional to $1/\sqrt{\rho}$ (here, use can be made of the result found in question 1 on the mean dislocation spacing). In the following we define

$$\Lambda = \beta/\sqrt{\rho}$$

In a polycristal with very small grains, the following alternative equation is usually preferred

$$\Lambda \approx D$$

with D the average grain size. Justify this second expression.

4) We consider a cubic grain with dimensions L_x, L_y and L_z. Dislocations are supposed to be of edge character with a Burgers vector $\mathbf{b} = b\mathbf{e}_x$, they glide in the planes $(x0y)$ and in the direction $\mathbf{e}_x$. Define the grain plastic shear induced by the displacement of a dislocation with an amplitude dx (here, we must assume that the grains are free of deformation at the boundaries, i.e. the surrounding grains do not alter the reference grain deformation).

5) Deduce from question 4 that the displacements dx made by each dislocations part of the dislocation density ρ_m induce a plastic deformation in the grains with the form

$$d\gamma_p = \rho_m b dx$$

6) From the previous results, show that the resolved shear stress τ that controls dislocation glide in a polycrystal with large grains evolves with the plastic deformation ϵ_p, as defined by the relation:

$$\frac{d\tau}{d\gamma_p} = \frac{\alpha\mu}{\beta}$$

Define the alternative equation that must be considered in a polycrystal with very small grain size?

7) The plastic strain hardening rate in each grain is defined by the quantity $\theta = \frac{d\tau}{d\epsilon_p}$. According to the simple model proposed in this exercise, describe the variations of θ as a function of the dislocation density ρ and the grain size D?

What is the name of the size effect observed when a reduction of the grain size D is considered?

8) Finally, calculate the grain size reduction that must be achieved in a polycrystal to increase its initial yield stress by a factor of 2.