

University of Liège

Department of Aerospace & Mechanical Engineering
Computational & Multiscale Mechanics of Materials



Development and numerical validation of a 2-scale computational model to study the mechanical behavior of nanocrystalline metals

by

Vincent Péron-Lühns

Submitted in fulfillment of the requirements for the degree of
Doctor in Engineering Sciences

January 2014

Ludovic NOELS	Thesis Supervisor
Frédéric SANZOZ	Committee Member
Antoine JÉRUSALEM	Committee Member
Laurent STAINIER	Committee Member
Jacqueline LECOMTE-BECKERS	Committee Member
Philippe GHOSEZ	Committee Member
Anne-Marie HABRAKEN	Committee Member

Contents

Abstract	5
Acknowledgments	7
Nomenclature	9
Abbreviations	15
1 Introduction	19
1.1 State of the art	19
1.2 Contributions	26
2 A two-scale model predicting the mechanical behavior of nanocrystalline solids	31
2.1 Grain constitutive model	31
2.2 Grain-boundary constitutive model	33
2.3 Two-scale numerical simulations	36
3 Two-scale computational modeling of intergranular fracture in nanocrystalline copper.	39
3.1 GB width calibration	39
3.2 Numerical validation	40
3.3 Dogbone study	40
4 Quasicontinuum study of the shear behavior of defective tilt grain boundaries in Cu	45
4.1 Methodology	45
4.2 Results	46
4.3 Model	46
5 Conclusions	51
6 Perspectives	53

Bibliography	57
A Annex to chapter 2: Paper 1	67
B Annex to chapter 3: Paper 2	69
C Annex to chapter 4: Paper 3	71
D Annex : Interim report	73

Abstract

This thesis presents a two-scale numerical tool aimed at predicting the mechanical behavior of nanocrystalline metals. To this end, a finite element model called direct numerical simulation, is calibrated (or atomistically-informed) using the quasicontinuum method (QC). The constitutive model is based on the mechanical behavior of two constitutive elements: the grains (or bulk crystals) and the grain-boundaries (GBs). The grains, governed by a forest dislocation-based hardening model, are calibrated according to their size and orientation by means of nanoindentation tests. GBs, taking the form of surfaces of discontinuities embedded in the continuum, are calibrated with QC according to their misorientations by applying tensile and shear loadings to bicrystals, allowing for the extraction of the elasto-plastic laws related to the GB opening and to the GB sliding behaviors, respectively. The method is numerically validated against full atomistic simulations. It is found that this two-scale method is able to predict the behaviors of the nanocrystals according to their specific GB character distributions and mean grain sizes, and to capture the competition between intragranular and intergranular plasticity. This thesis demonstrates the ability of such a method to also predict the weakest points and the direction of crack propagation in nanocrystalline structures. A simplified calibration strategy aimed at reducing the computational cost for structures consisting of a substantial number of grains is also proposed. Moreover, this work presents a possible way to improve the model with respect to the GB maximum shear stresses by introducing nano-scaled voids within GBs, opening the way to a better understanding of mechanisms taking place in defective GBs.

Acknowledgments

Je tiens à remercier le Prof. Ludovic Noels pour ses conseils avisés et son incroyable disponibilité tout au long de ce travail de thèse.

Je remercie le Prof. Laurent Stainier de m'avoir offert la possibilité de me lancer dans cette thèse.

Je remercie tout spécialement le Prof. Frédéric Sansoz pour son accueil chaleureux à son laboratoire du Vermont et pour son aide particulièrement précieuse dans ce travail.

Je remercie le Prof. Antoine Jérusalem pour son accueil à Madrid et pour ses excellents conseils aussi bien personnels que professionnels.

Je remercie plus généralement les membres du personnel du LTAS pour leur aide et leur gentillesse.

Je remercie ma grande soeur pour ses conseils éclairés et je lui en veux un peu quand même d'avoir mis la barre aussi haut :)

Je remercie mes amis Agnieszka, Neil et Victor qui m'ont accompagné pendant toutes ces années et ont su me supporter et trouver les mots dans les moments difficiles.

Et puis, je ne peux pas m'empêcher de remercier tous mes amis avec qui je me suis amusé pendant tout ce temps et qui m'ont permis de voir les choses sous un angle festif et sympathique. Je pense notamment à Virginie, Marie, Sarah, Guillaume, Gilouto, Vincent, Tom, JC, Benito, Charly, Guara, James, Olga, Henri, Chris, Christina...

Nomenclature

List of symbols

$a^{\alpha\beta}$	Interaction matrix coefficients
\mathbf{a}_α	Covariant basis vector in the grain-boundary element referential
b	Burgers vector
B_0	Region occupied by the body in the initial configuration
B_0^g	Region occupied by grain g in the initial configuration
B	Region occupied by the body in the current configuration
$\underline{\mathbf{b}}$	Body forces
C_{11}, C_{12}, C_{44}	Elastic constants
d	Grain diameter
D	Damage parameter of a grain-boundary
F_i	Energy embedding atom i
G	Shear modulus of a grain-boundary
g_0	Initial critical resolved shear stress
g^α	Critical resolved shear stress on slip system α
\dot{g}^α	Flow stress on slip system α
h	Grain-boundary width
$h^{\alpha\alpha}$	Hardening diagonal modulus of slip system α
h_{GB}	Pseudo grain size/distance grain-boundary to indented surface
\mathbf{I}	Unity tensor
l	Distance between two forests of dislocations
m	Strain-rate sensitivity exponent in grain
$\underline{\mathbf{n}}$	Grain-boundary surface normal in the deformed configuration
n_α	Density of obstacles in system α

continued on next page

continued from previous page	
\underline{N}	Grain-boundary surface normal in the initial configuration
S	Midsurface in the grain-boundary element
S^+	Facet corresponding to the tetrahedra on the positive side of a grain-boundary
S^-	Facet corresponding to the tetrahedra on the negative side of a grain-boundary
s^α	Strength of the obstacle in slip plane α given by a pair of forest dislocations
p	Centrosymmetry parameter
V	Void volume fraction in grain-boundary
\bar{t}	Grain-boundary traction
∂B_0	External boundary of a polycrystal aggregate in the initial configuration
∂B_0^{ext}	External exposed boundary of a polycrystal aggregate in the initial configuration
∂B_0^g	Boundary of grain g in the initial configuration
∂B_0^{gb}	Grain-boundary surface in the initial configuration
$\underline{\delta}$	Displacement jump at the grain-boundary
δ_c	Strain-to-failure opening of the grain-boundary
$\underline{\delta}_n$	Normal component of the displacement jump at the grain-boundary
$\underline{\delta}_s$	Sliding component of the displacement jump at the grain-boundary
$\Delta\Psi$	Grain-boundary misorientation
$\underline{\underline{\epsilon}}$	Strain at the grain-boundary
ϵ_0	Grain-boundary reference plastic strain
$\underline{\underline{\epsilon}}_n$	Normal component of the grain-boundary strain
$\bar{\epsilon}_p$	Grain-boundary effective plastic strain
$\underline{\underline{\epsilon}}_s$	Sliding component of the grain-boundary strain
$\dot{\gamma}_0$	Reference shear strain rate
γ_{sat}	Saturation shear slip
$\dot{\gamma}^\alpha$	Current shear strain rate on slip system α
γ^α	Shear strain on slip system α
<i>continued on next page</i>	

continued from previous page	
γ_c^α	Characteristic shear strain on slip system α
μ	Shear modulus in grains
R_{ij}	Distance between atoms i and j (EAM theory)
$\rho_{h,i}$	Host electron density at atom i (EAM theory)
ρ	Background electron density (EAM theory)
ρ_{sat}	Saturation dislocation density (Ref. A)
ρ_0	Material density in the initial configuration (Ref. A)
ρ	Material density in the current configuration (Ref. A)
ρ^α	Dislocation density in slip system α (Ref. A)
$\underline{\underline{\sigma}}$	Cauchy stress tensor
σ_0	Grain-boundary initial yield stress in sliding
σ_c	Critical stress in grain-boundary opening
$\underline{\underline{\sigma}}^{op}$	Grain-boundary opening stress component
$\underline{\underline{\sigma}}^{sl}$	Grain-boundary sliding stress component
σ_{max_0}	Maximum shear strength of a perfect grain-boundary
σ_{max}	Maximum shear strength of a defective grain-boundary
σ_p	Yield stress corresponding to $\bar{\epsilon}_p$
σ_v	Void-induced stress
ϕ_{ij}	Core-core pair repulsion between atoms i and j (EAM theory)
$\underline{\varphi}$	Deformation mapping
$\underline{\varphi}^+$	Deformation mapping for the top surface of the grain-boundary
$\underline{\varphi}^-$	Deformation mapping for the bottom surface of the grain-boundary
$\underline{\tilde{\varphi}}$	Mean deformation mapping of the grain-boundary
τ^α	Resolved shear stress on slip system α
τ_c^α	Characteristic resolved shear stress on slip system α

Abbreviations

Abbreviations	
2D	Two-dimensional
3D	Three-dimensional
BCC	Body-centered cubic
BEM	Boundary element method
CPU	Central processing unit
CPFE	Crystal plasticity finite-element method
DC	Direct electric current
DNS	Direct numerical simulation
CSL/ Σ	Coincidence site lattice GB
CRSS	Critical resolved shear stress
EAM	Embedded-atom method
ECAP	Equal channel angular pressing
ED	Emission of dislocations from periodic defects
EV	Emission of dislocations from voids
FCC/fcc	Face-centered cubic
FEM	Finite-element method
GB	Grain-boundary
GBCD	Grain-boundary character distribution
GBE	GB engineering
HA	High-angle
<i>continued on next page</i>	

continued from previous page	
HAB	High-angle boundary
HC	Hexagonal compact
HP (effect)	Hall-Petch (effect)
HP	Homogeneous and partial GB migration
HS	Homogeneous shuffling
HT	Homogeneous and total GB migration
IP	Inhomogeneous and partial GB migration
LA	Low-angle
LAB	Low-angle boundary
MC	Microcrystalline material
MD	Molecular dynamics
MS	Molecular statics
NC/nc	Nanocrystal
PS	Partial shuffling
QC	Quasicontinuum
RHP (effect)	Reverse Hall-Petch (effect)
RVE	Representative volume element
SPD	Severe plastic deformation
SMAT	Surface mechanical attrition treatment
TB	Twin boundary
TJ	Triple junction
UFC	Ultrafine crystalline material

Chapter 1

Introduction

1.1 State of the art

The discovery of metals and their alloys has greatly contributed to the evolution of humankind, allowing us to move from cave-dwelling humans to today's modern society. The mastery of this material took time. We first broke rocks to extract the shiny material, we forged and gave it shapes adapted to our needs, as hunting weapons or agricultural tools. We mixed copper with tin to make it harder compared to pure copper (Bronze Age). Iron then came into play (Iron Age), providing lighter, harder and less expensive tools. Since then, this will to improve metal's features has not abated.

About fifty years ago, Hall and Petch discovered how to strengthen metals by reducing the size of their crystallites (or grains). This discovery took the name of Hall-Petch (HP) effect [34, 67]. In 1968, Hirth and Lothe [35], who were focusing their research efforts on dislocation study, proposed to explain this HP effect by using a pile-up model assuming that dislocations were stopped at the grain boundaries (GBs), hence strengthening the material. A few years later, highly cold wire drawing resulted in alloys presenting an extraordinary strength compared to usual coarser grained materials [68]. This peculiar behavior was due to the nanosized grains that make up these alloys. This discovery probably inspired Gleiter [29] who declared that making nanocrystalline materials might open up the path toward significant improvements of the mechanical properties of metals and alloys. Gleiter's work predicted these properties: fracture resistance and ultrahigh yield strength, better wear resistance, and possible superplastic mechanical behavior. Three new material classes were named according to the grain sizes. We now talk about nanocrystalline (NC) materials when the sample presents at least one dimension smaller than 100 nm [30]. The term ultrafine crystalline (UFC) materials is used from 100 nm to 1 μm . Finally, when the average grain size is larger than 1 μm we use the term microcrystalline (MC) materials. At first these structures were studied experimentally, however the material processing appears to be a limiting factor in a full understanding of the material's behavior, motivating the use of numerical models.

1.1.1 Experimental approach

When processing such materials in order to capture the intrinsic material response, it is essential to control different features. It is necessary to control the defect concentration, the grain size distribution, the crystallographic orientations, the porosity, the residual stresses and the internal strains. Among all the developed techniques, three of them hold the most prominent ability to control these intrinsic properties: electrodeposition, severe plastic deformation (SPD), and cluster deposition techniques.

The electrodeposition technique is the oldest one which makes it possible to obtain the following intrinsic properties. Electrodeposition has the advantage of producing a large number of grain nuclei, which enables the achievement of a significant reduction of the grain size [58]. Growth texture with a grain size of 30 nm can be obtained using direct electric current (DC) electrolysis in the case of Ni [19]. Texture-free and pore-free NC metals with grain sizes below 20 nm have also been obtained using pulse procedures [58, 54].

The SPD technique, in turn, has the ability to provide perfectly dense bulk materials which is very interesting for the mechanical properties [95]. Conventional SPD techniques often produce UFC with grain sizes larger than 100 nm rather than NC and some additive processes, such as the surface mechanical attrition treatment (SMAT) are needed to refine the grains in the nanometer range [53]. Nevertheless, these SPD techniques are also known for the wide grain size distribution they produce, which acts as a limiting factor on the understanding of NC intrinsic properties.

Finally, the cluster deposition techniques or nanocluster techniques provide grain sizes of just a few nanometers with a narrow grain distribution [14]. It also allows, by judiciously choosing the substrate, the texture of the sample to be “tailored”, which constitutes a particularly powerful tool for texture analysis.

Grain-boundary engineering

It is partially due to these aforementioned processing techniques that huge progresses in engineering microstructures at the nanoscale have been made recently. Nanostructuring also offers the possibility to improve mechanical properties such as strength and hardness [8] and ductility [55], among other interesting mechanical properties, and allows for a better understanding of how to control the strain-rate and temperature strength dependencies [85, 13, 99]. Furthermore it is worth noting that other properties such as a higher electrical conductivity can be achieved using nanoscale growth twins [54]. Watanabe was the first person to propose the concept of “GB design” [101], a concept that took the name of “GB engineering” (GBE) and is now well established [102]. Because GBs were identified as preferential sites for crack nucleation and propagation, reinforcing them appeared as a way to strengthen the material. The idea was to improve the resistance to intergranular fracture by increasing the proportion of strong GBs. The success of these techniques [52] was attributed to the high proportion of “special GBs”. It is now known that these special boundaries belong to two classes: low-angle boundaries

(LABs) and coincident site lattice GBs (CSLs). On the one hand, LABs are the GBs that present low misorientation angles, lower than 10 degrees [75,4], or between 9 and 14 degrees [86]. Note that when a GB presents a higher misorientation angle, it is called a random boundary or a high-angle boundary (HAB), and its properties are not considered as specials. On the other hand, the CSL type nomenclature is represented by a sigma (Σ) followed by the reciprocal density of coincident atoms in the GB interface. CSLs¹ are considered as specials in terms of properties only if a periodic structure in the boundary plane is maintained [87]. Nowadays, only $\Sigma 3$ and $\Sigma 3^n$ types are the special GBs processed experimentally to improve the mechanical properties of NC materials [70].

While the increased fraction of special boundaries contributes in substantial enhancements, like for instance corrosion resistance [62, 52], creep resistance [43], and stress corrosion cracking resistance [62, 9], the grain boundary network topology cannot be properly described without considering triple junction (TJ) network or distribution, which is particularly important in hindering crack propagation mechanisms [69]. TJs can be classified according to the number of special boundaries that coordinate them. Type 0-CSL TJ consists of 3 HABs, and type 1-CSL, 2-CSL and 3-CSL have 1, 2 and 3 special boundaries respectively. The fraction of special boundaries controls the TJ mechanical behavior. From the experimental point of view, the thermomechanical processing allows for the reorganization of GBs toward lower energy configurations, i.e. low CSLs, and opens the way to a relative control of the triple junction distribution [47]. However, the experimental control of this distribution is still in its infancy.

Limits of the experimental approach

The evolution of the experimental techniques has allowed the highlighting of the impact of nanostructuring polycrystals on the macroscopic behavior of these materials, and has resulted, inter alia, to the advent of the GBE concept. This latter technique aims to improve the mechanical properties of polycrystals by creating the appropriate GB network and is becoming increasingly popular. However, the experimental approach requires fastidious material manufacturing and preparation. These processes are also particularly expensive and time consuming. Moreover, these techniques are still unable to access the structural parameters, or so-called “hidden parameters”, that can give accurate insights on the mechanical properties of NC materials. During the past years the wide range of new experimental researches flourishing in this area were not truly representative of the tremendous potential of these materials because of the difficulty met for properly preparing NC samples [47]. This has motivated the development of numerical approaches.

¹The terms low- Σ CSLs and high- Σ CSLs were first used to determine whether a given GB would present special properties or not. However, a lower Σ value, i.e. involving a higher density of coincident atoms in the GB interface, is eventually not a sufficient criterion as special properties were observed for high- Σ values and sometimes not observed for low- Σ values [69].

1.1.2 Numerical approach

In parallel with these experimental techniques, the numerical tools appeared to be very efficient methods to predict the possible deformation mechanisms taking place in such nanostructures. Consequently an increasing interest in numerical approaches has arisen. In fact, because of the small scales involved, only this last approach can inform directly on GBs, TJs, or internal stress distribution, among other fundamental structural parameters of the nanoscale.

Molecular dynamics

Molecular dynamics is a computer simulation method created in the late 50s [1]. This method allows for the prediction of the movement of atoms on the basis of force fields derived from potential energies defined by solving the Schrödinger equation.

MD has been a powerful tool in unveiling the peculiar behaviors taking place at the nanoscale, most of the time unreachable experimentally. It is now very well known that NCs are grain size dependent and MD helped in highlighting the reasons for this dependency. In the normal polycrystalline regime, plasticity is known to be governed by dislocation-dislocation interactions, i.e. by intragranular plasticity. Then, when decreasing the grain size, a fundamentally different dislocation activity is triggered. Indeed, between 12 to 30 nm, all simulations indicate first a dislocation-based intragranular deformation mechanism, and second, that dislocations are also emitted from the GBs [82, 108, 97, 105, 76, 17, 81]. The propagation of dislocations emitted from these two sources of dislocations leads to pile-ups at GBs which result in a consequent hardening of the material, responsible for the HP effect. Below 10 to 12 nm, the intragranular dislocation propagation becomes increasingly more difficult and plasticity is found to be dominated by intergrain deformation mechanisms [96, 47], leading to a reduction of the yield and flow stresses. This phenomenon, implying the existence of a strongest grain size [110] for a given material, is known as the reverse or inverse HP effect (RHP) [39] and was also observed experimentally [22].

MD nonetheless suffers from the requirement to consider the dynamics of all atoms one by one, which imposes drastic limitations on the size of the sample simulated. The MD method is also limited to simulations with very high-strain rates, and is therefore suitable for fast loading such as shocks for instance. Other numerical methods, such as the finite element method, have been developed and make it possible to transcend the length-scale and time-scale limits of MD.

Finite element methods

Several techniques using continuum models and in particular the finite element method (FEM) have been developed and used to describe the mechanical behaviors of polycrystals. The FEM approach is a traditional approximation of the weak form used to describe the mechanics of materials [37, 111]. In this framework, materials are

considered to be infinitely divisible media. Becoming more conscient about the importance of understanding the underlying mechanisms taking place at the lower length scales in the matter, Pierce has developed in 1982 [63] a multiscale method in order to treat the crystal plasticity. His method, called the crystal plasticity finite element method (CPFE) has been used as a multimechanism and multiphysics platform. Since then, this approach has been applied to various crystal mechanical problems, see the overview of Roters et al. [72]. In this framework, the FEM is used as a variational solver for the underlying constitutive equations treating the anisotropic elasto-plastic deformation of different types of lattice defects, i.e. dislocations, disclinations, twins and more generally GBs. These constitutive equations governing the deformation may be incorporated in two different kinds of models. Either the model is said to be “local” and the stresses are computed on the basis of the displacement field only, or the model is said to be “non-local” and is also based on the strain-gradient. In other words, the description of the deformation of the material in the local models is achieved by using higher order terms. Thus according to the approach, local or non-local, considerations of crystal defects and the associated mechanisms are treated in a different manner.

In the local approach case, when dealing with NCs, the integration of the GBs has been treated in a variety of ways. Grain interior and boundary processes were included in a homogenized way [41, 26]. GBs were also explicitly treated as continuum regions with different properties [85, 104] or interfaces elements were introduced in the finite element mesh [103, 100]. These studies have been mainly limited to two-dimensional (2D) analyzes focused on the ability of the continuum approach to describe the grain size dependency [104, 100], the strain localization [27, 100] and the failure process [104, 103]. Also, three-dimensional (3D) models have been proposed for analysing polycrystalline materials [10, 36] with the desire to be more realistic and to complement experimental investigations. This was also motivated by the complex three-dimensional mechanisms taking place in these materials, such as the geometry influence on the microcracking evolution, competition between different failure modes. Jérusalem and Radovitzky [39] proposed a finite element formulation of the continuum three-dimensional problem. This model explicitly describes the deformation of polycrystal grains and the GBs are considered as surfaces of discontinuities with a finite thickness embedded in the continuum. GB sliding was incorporated in the model to demonstrate its ability to reveal the softening of NC metals with decreasing grain sizes (RHP effect). However, a unique arbitrary constitutive law was used to characterize all the GBs, despite the different natures of the GBs (HAB, LAB, or Σ). An alternative is to use judicious distributions of properties in GBs based on statistics to describe the mechanical behavior of GBs in polycrystalline materials [44]. This approximation of the nature of GBs of NC metals, which makes the specific behaviors of the textures difficult to be captured, is due to the lack of data available in the literature. As a consequence, the description of the mechanical behavior of GB networks has mainly been studied through arbitrary or statistical techniques. A finer and more accurate description appears as a necessary step for an increased understanding of the deformation mechanisms involved in nanocrystalline

materials. Recently, Benedetti [3] developed a three-dimensional formulation for the analysis of intergranular degradation and failure in polycrystalline materials based on the boundary element method (BEM). The BEM is an alternative to the FEM that has proven its efficiency for physical and engineering problems [106, 2]. Nevertheless, this latter approach still focuses on MCs and not on NCs.

While some of the mechanisms taking place at GBs can be reproduced in the local framework, deformation mechanisms referred to as core contributions, i.e. for instance, the emission or absorption of dislocations by GBs, requiring to deal with higher order terms, cannot be taken into account with the local approaches. Thus this constitutive framework appears insufficient to describe the huge complexity of the crystal plasticity. In fact, these theories must be of higher orders, not only by incorporating the strain gradients but also by having higher order stresses that are work conjugate to the strain gradients, making possible the modelling of extra boundary conditions. Gurtin and Anand [32] have first developed a small-deformation strain-gradient theory plasticity for isotropic materials in the absence of plastic rotation, resulting in a tensorial second-order partial differential equation for the plastic strain, and then have extended the model to large-deformation [31]. Gurtin has recently developed a theory of rate-independent single-crystal plasticity at small length scales [33]. In this latter framework, microscopic stresses are related to the tangential gradients on the individual slip systems and the initial-boundary values are placed in a variational setting. As a result, this model can determine the active slip systems and the location of the elasto-plastic interface at any time. However, in the approach of Gurtin, higher order stress quantities can change discontinuously for bodies subjected to arbitrarily small load changes, causing physical deficiency. Based on the work of Gurtin, the elasto-plastic theory of crystal defect field presented in Ref. [23, 24, 93] accounts for the translational and rotational incompatibility of the lattice associated with dislocations and disclinations in a continuous fashion. As a result, these models are able to take into account the dislocation-GB interactions, thus capable of capturing size-dependent behaviour of metals at the micron scale. Also, in the theories proposed by Muhlhaus and Aifantis [57], and Fleck and Hutchinson [20], the strain-gradients induced by the deformation phenomena at the microscale are taken into account by generalizing the classical J2 flow theory of plasticity. Nevertheless, thermodynamic requirements on plastic dissipation are not always satisfied. Other work [38] intends to rectify this physical deficiency. As a summary, although these models are of clear interest to describe the crystal defects mechanics, higher orders mechanics still needs to be improved. Based on the J2 flow theory of plasticity, these frameworks remain isotropic, adapted only to the microscale, i.e. not the nanoscale, and cause problems from a physical point of view. They finally remain oversimplified on several accounts due to the difficulties encountered when determining physical parameters such as, for instance, the elastic constants for the couple-stresses that are yet unknown. The quasicontinuum method, presented in the next Section, appears as a suitable technique to determine some of these parameters.

The quasicontinuum method

The quasicontinuum(QC) method was developed by Tadmor, Ortiz, and Phillips, see Ref. [91], and is a molecular statics technique finding the solution of equilibrium atomic configuration by energy minimization, given externally imposed forces or displacements. As for MD, the potential energies are defined by solving the Schrödinger equation. Also, comparatively to the MD that is a fully-atomistic technique and presents length-scale limits, the QC method does not suffer from this problem. Indeed, aimed at modeling atomistic systems, the problem is modeled without explicitly representing every atoms in the cell; here, regions of small deformation gradients are treated as continuum media by a finite element method. In this scheme, the connection between continuum and full atomistic is made in a seamless manner, i.e. that there is no discontinuity in the energy state at the continuum/atomistic frontier. Indeed, the QC uses continuum assumptions to reduce the degrees of freedom and computational demand without losing atomistic details in regions where it is required. In this manner the cell size can be large enough to provide realistic boundary conditions. This method has been particularly useful, for instance, in predicting the GB mechanical behavior under shear and tension [79, 80]. A detailed overview of the QC implementation is available in Ref. [56]. Note that an interim report overviewing the routines involved in the QC code is also available in Appendix D. We present in this Section the embedded atom method (EAM) used to determine the potential energies governing the interactions between atoms in the QC method. We then expose the limitations of the QC method in order to understand its relevance in the framework of this thesis work.

The embedded atom method

The EAM potential provided by Foiles et al. [21] for copper was used for all QC simulations presented in this thesis. In this latter work, the authors have showed that within the framework of the density-functional theory, the total energy for an arbitrary arrangement of nuclei can be written as a unique functional of the total electron density. Here, the total energy can be approximated by

$$E_{tot} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j(\neq i)} \phi_{ij}(R_{ij}) \quad (1.1)$$

In this expression, $\rho_{h,i}$ is the host electron density at atom i due to the remaining atoms of the system, $F_i(\rho)$ is the energy to embed atom i into the background electron density ρ , and $\phi_{ij}(R_{ij})$ is the core-core pair repulsion between atoms i and j separated by the distance R_{ij} . The electron density being

$$\rho_{h,i} = \sum_{j(\neq i)} \rho_j^a(R_{ij}) \quad (1.2)$$

where $\rho_j^a(R)$ is the electron density contributed by atom j . Using equation (1.1) leads to a cutoff distance of 4.950 Å for copper.

The QC limitations

The QC method available on www.qcmethod.com and which is used in the context of this thesis is a freeware submitted to certain limitations that are enumerated in the following.

- This code is limited to 2D problems that can be described with the following displacement field

$$u_x(x, y), u_y(x, y), u_z(x, y)$$

- Despite this 2D constraint, every calculation is performed in 3D. This amounts to simulating a slice whose thickness is equal to the minimum crystallographic distance in the out-of-plane direction (Plane State of Stress).
- The code is limited to crystalline materials with a simple lattice structure as the face-centered cubic (FCC) and body-centered cubic (BCC) structures. It is therefore not possible with this version of QC to simulate complex structures such as hexagonal compact (HC) ones or asymmetric units containing several species. Note that it is possible to simulate systems with multiple structures and species if they are in separate grains.
- This code is a quasi-static model based on energy minimization. It can be used to study the equilibrium structures at zero temperature, but does not allow the simulation of dynamic processes and effects at given finite temperatures due to the current version of the implementation of the software.
- The atomic interactions are limited to empirical potentials. The total energy of the system is equal to the sum of the energies of the atoms in the system.
- These limitations concern the QC version considered here. In fact, the extension to 3D [71], to complex crystals [92, 15], or to problems at finite temperatures [18] are subject of various studies.

Finally, the QC method is not adapted for large NC simulations and would degenerate to a full atomistic method as the small size of the grains requires all the atoms to be modelled. The QC method would thus suffer from length-scale limitation in the NC context.

1.2 Contributions

In this thesis, we develop a numerical tool which provides the advantages of both methods (Atomistic model and FEM), that is, keeping the powerful prediction ability

of atomistic models without suffering from drastic limitations on the size of the samples studied. To predict the NCs mechanical behaviors according to their specific texture, also called grain-boundary character distribution (GBCD), an FEM algorithm with embedded surfaces as GBs, called direct numerical simulation (DNS), is calibrated by using the QC method. In this way, we provide a FEM algorithm atomistically-informed, i.e. a two-scale model. The ability of the DNS model to predict the mechanical behavior of NCs is based on the constitutive behavior of two elements, the grains on the one hand, and the GBs on the other. As outlined above, the nanomechanisms involved in these two elements are of different natures and must therefore be calibrated by a different manner.

With regard to grains, plasticity is governed by dislocation motions, by dislocation-dislocation and GB-dislocation interactions. In addition, the grain size effect induced by this latter interaction (GB-dislocation) must also be considered as being able to faithfully reproduce the mechanical behavior of grains. The explicit formulation described in Ref. [45], enabling large scale computations, is adopted for the intragranular FCC polycrystal plasticity constitutive model. In this model, the constitutive response of grains is described with a forest dislocation-based hardening model. Note that we use the parameters available in the literature [11] to evaluate the dislocation-dislocation interactions. By contrast, our contribution lies here in the development of a calibration model enabling the prediction of the initial critical resolved shear stress (CRSS) required to activate the FCC slip systems responsible for dislocation motions in grains, while taking into account both the size effect and the grains crystallographic orientations. To this end, the CRSS of FCC slip systems are determined by means of nanoindentation tests with QC. Also, the size effect is captured by adding a GB in the vicinity of the indenter and by varying the distance GB-indentation surface, which distinguishes the current study from the one presented in Ref. [90] by QC designers. It is also worth noting that for this GB-dislocation interaction, both LAB or HAB types are used to reflect the size effect in both LA- or HA-type GBCDs or textures. On the basis of this calibration process, a higher CRSS is found, and thus a grain hardening is predicted when decreasing the grain size below 4 nm, highlighting the increased difficulty for dislocations to move in such small grains.

In the FEM developed up here, GBs are treated as surfaces of discontinuities embedded in the continuum, following the work presented in Ref. [39]. In this latter work, one arbitrary constitutive law was used to describe all the GBs and was limited to GB sliding only. On this basis, the model is implemented with decohesion/opening ability for GBs in order to allow for the direction of the intergranular crack propagation to be captured. By applying shearing and tensile loadings on bicrystals using the QC method exposed in Ref. [79, 80], the elasto-plastic parameters governing the GB responses are determined according to their specific misorientations. It should also be noted that the determination process to obtain these GB parameters is automated in the framework of this thesis, i.e. automation of the research of the best GB energy configuration and setting of the GBs simulation parameters. Moreover, this GB sliding and opening calibration process provides an opportunity to define the evolution of these parameters

according to their misorientations, something that is unprecedented. In particular, the identified trends concern yield stresses, Young and shear moduli, GB energies, critical stresses, strain-to-failures and GB widths. Critical stresses and strain-to-failures are found to be significantly higher in LABs than in HABs. In addition, HABs are found to be wider than LABs. Although adaptable to other tilt axes, this work only considers GBs with the $[1\bar{1}0]$ tilt axis. This is due to the 2D nature of the QC software and makes this framework solely suitable for addressing columnar thin films. Although the limit arises from the QC model, the FEM used in this work is however able to deal with finite-temperature 3D problems for a large range of strain-rates, and this in the case of more general crystalline solids.

Once the two-scale model is completely calibrated (grains and GBs), it is tested on a 16-grain and 34-GB representative volume element (RVE) for different mean grain sizes and different textures (LA and HA). Then the model is numerically validated by comparing it in the same loading conditions to a fully-atomistic QC model. We demonstrate that the global stiffness of the NC is highly dependent on the width and the nature of the GBs that constitute it. We show that setting HABs widths to a unique value of 1.5 nm does not induce any discrepancy in the NC response. Conversely, LABs appear to be more sensitive to their widths calibration. In particular, we show that the direction of the crack propagation is highly dependent on the width calibration in the LAB case. It is found that both models predict the same trends concerning not only the homogenized Young moduli and yield stresses, but also the weak points of the GB networks considered and the direction of the cracks propagation. Moreover, the model demonstrates its ability to predict the behavior of these textures according to their specific natures. In addition, the model is able to capture the reverse Hall-Petch effect [82], i.e. the softening of the NC metals when decreasing the grain size or, in other words, it is able to predict the switching from an intragranular plasticity toward an intergranular plasticity.

We then illustrate the ability of the model to address structures presenting a large number of grains and GBs. To this end, we apply the method to a HA-type dogbone consisting of 103 grains and 251 GBs. For that study, the GBs are not calibrated from QC simulations but from a fitting of the trends resulting from previous GB simulations with QC. Through this HA-type dogbone simulations, the method highlights notably the importance of the competition between intragranular and intergranular plasticity when dealing with such small grains.

Despite the care devoted to the calibration of the two-scale model, the predictions of NCs behaviors remain nevertheless overvalued compared to experiments and MD simulations. This is mainly due to the 2D nature of QC and also because no thermally activated processes are accounted for in the QC simulations. Also, the GBs simulations only address the issue of GBs presenting a perfect crystallographic organisation. In fact, no defects, kinks, or nanovoids are included in the GB response. Thus an effort was made to improve the GB model by inserting nanoscaled voids (nanovoids) within them. This is the first time that such simulations are achieved. We demonstrate here

that such nanoscale defects have a profound impact on the interfacial shear strength and underlying deformation mechanisms in copper GBs due to void-induced local stresses. We emphasize three kinds of dependencies whether the involved nanomechanisms are GB-mediated dislocation emission, interface sliding or shear-coupled GB migration. For all GB types, the interfacial shear strength is shown to decrease linearly as the volume fraction of voids at the interface increases. In addition, owing to larger void-induced stresses, this decrease is found to be much more pronounced in the GBs deformed by shuffling than by other mechanisms. This last study constitutes a first step aimed at improving the predictions of the two-scale model.

In sum, this thesis introduces the following novelties:

- Development of an atomistically-informed two-scale model: We enhanced the FEM proposed in Ref. [39] by fully calibrating the GBs. To this end, the research of the parameters of GBs undergoing tensile and shear loadings using QC has been automated and a GB decohesion model has been added in the DNS framework. The CRSS of the plasticity model presented in Ref. [11] has been calibrated using a QC nanoindentation model accounting for dislocation-GB interactions and grain sizes.
- Development of a fully-atomistic QC model of a large polycrystalline RVE with a view to validating the two-scale model.
- Adaptation of the two-scale model for larger problems: To this end, a simplified GB calibration adapted to HA-type textures has allowed to perform large (> 100 grains) and atomistically-informed NCs simulations accounting for both the grain size and texture.
- Study of defective GBs with a view to enhancing the two-scale model: A defective GB model with QC has been developed and allowed for the development of a void-induced stress model.

This thesis is based on the compilation of two published papers [64, 66] and on a paper [65] currently under review. These three papers are attached in Appendix A, C and B, respectively, and are summarized in the following three chapters.

Chapter 2

A two-scale model predicting the mechanical behavior of nanocrystalline solids

In this first Chapter, the numerical multiscale model is presented. The aim of this model is to predict the mechanical behavior of NC metals/solids by taking into account their specific crystallography or GBCDs, without suffering from the length scale limitations encountered when dealing with atomistic simulations. To this end, the constitutive equations of both constitutive elements (grains and GBs) are exposed. The calibration of these models are then achieved by recourse to QC through GBs and nanoindentation simulations. Finally, the application of the method on a 16-grain and 34-GB RVE is presented for two GBCDs.

2.1 Grain constitutive model

In this framework, grains are discretized with a fine mesh and the elasto-plastic formulation described in Ref. [45] for the FCC polycrystal is used to address the forest dislocation-based hardening model of grains. The following power-law is used to describe the shear rate deformation of each slip system α

$$\dot{\gamma}^\alpha = \begin{cases} \dot{\gamma}_0 \left[\left(\frac{\tau^\alpha}{g^\alpha} \right)^{\frac{1}{m}} - 1 \right], & \text{if } \tau^\alpha \geq 0 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.1)$$

where $\dot{\gamma}_0$ is the reference shear strain rate, m the strain-rate sensitivity exponent, and where g^α and τ^α are the critical resolved shear stress (CRSS) and the resolved shear stress on slip system α , respectively. Based on statistical mechanics [61], the evolution of the flow stresses in the case of multiple slip systems is governed by a diagonal hardening

law

$$\dot{g}^\alpha = \sum_{\beta} h^{\alpha\beta} \dot{\gamma}^\beta \quad (2.2)$$

where $h^{\alpha\beta}$ are the diagonal hardening moduli. This formulation, based on the activation of slip planes, allows for the intragranular plasticity to occur when one of these slip planes α reaches a critical value called critical resolved shear stress (CRSS), g^α . In this hardening model, the initial value (i.e. before hardening) of g^α is g_0 . The originality of our method consists in calibrating this value with the QC method by means of nanoindentation tests, see Figure 2.1. In these QC simulations, a rigid rectangular indenter

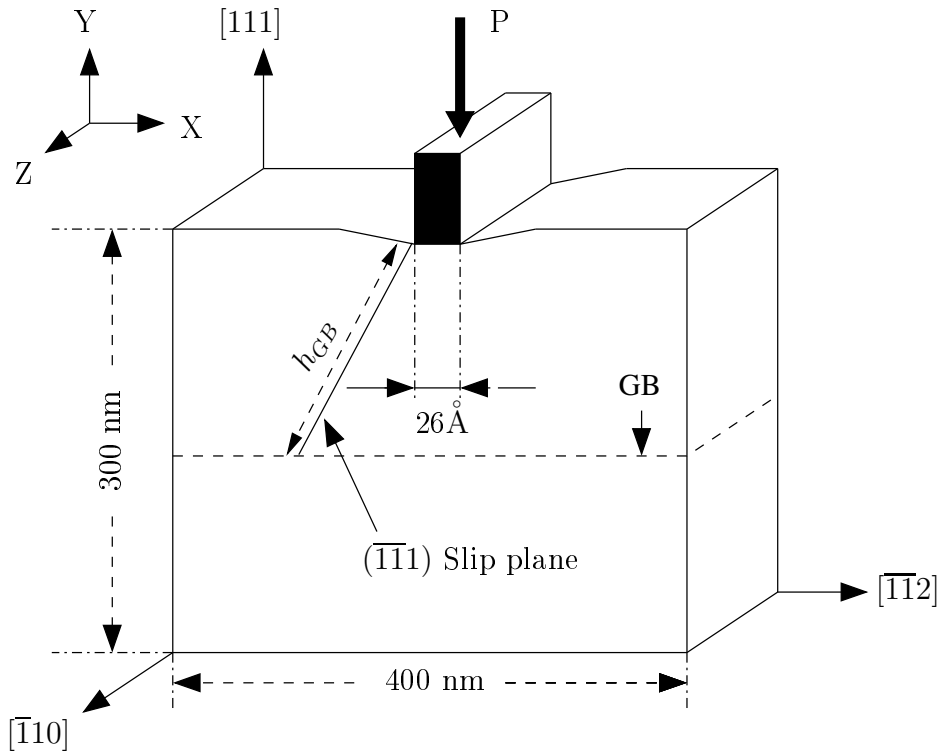


Figure 2.1: Schematic representation of the nanoindentation model with a GB.

is driven into a thin copper film. g_0 is taken as being the maximum stress measured before a partial dislocation emission from the indented surface. A grain size effect is added in the QC model by inserting different GB kinds (HA or LA) in the direction of the propagation of the partial dislocation. These GBs are supposed to impede, or not, the motion of the incipient dislocation. It is worth noting that the QC method does not offer the possibility to compute the atomic stress in the non-local zone, i.e. in the atomistic zone. This poses a problem since it is precisely in this zone that the dislocation motion appears and that g_0 must be computed. To overcome this problem, we have developed an algorithm allowing for the virial stress to be computed according to the atomic positions, as it was already developed in Ref. [89]. The computation of

the virial stress is based on the virial theorem exposed by Clausius and Maxwell in 1870 and is generally not considered as a relevant computation of the atomic stress due to the difficulties encountered when trying to evaluate the atomic volume in a deformed configuration. To address this issue, a voronoï 3D tessellation built with the voro++ library available on the internet, allowed us to compute the volume occupied by each atom and therefore, resulting in a virial stress presenting all mechanical stress characteristics. Eventually, for both GB kinds, g_0 increases when the grain size is decreased, highlighting the empediment to the motion of the dislocation for small grain sizes, as shown in Figure 2.2.

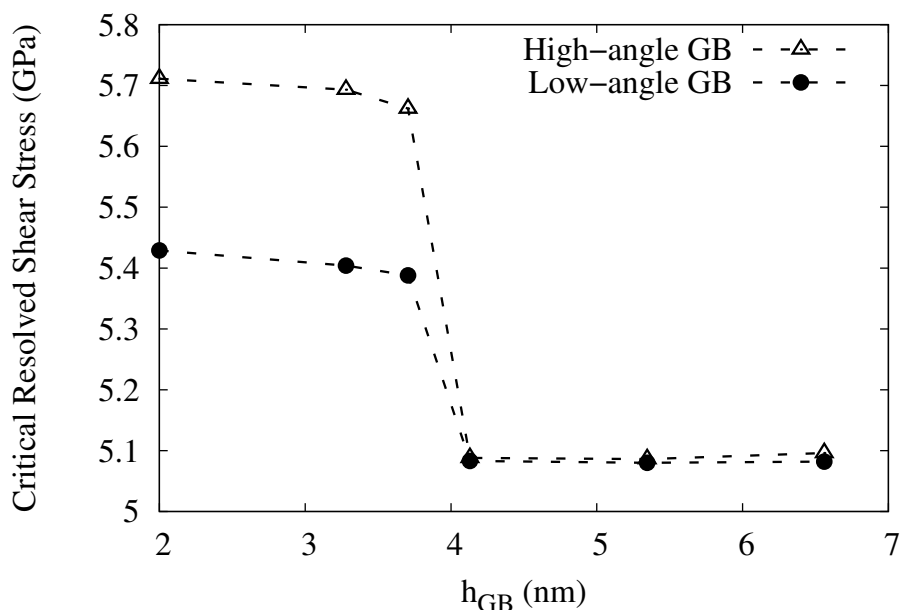


Figure 2.2: Initial CRSS (g_0) evolution with h_{GB} for HA and LA GBs.

2.2 Grain-boundary constitutive model

In the FEM model, GBs are surfaces of discontinuities embedded in the continuum, see Figure 2.3. The local stress state is described by the Cauchy stress tensor $\underline{\underline{\sigma}}$ whereas local information about the material deformation is conveyed by the deformation gradient field $\underline{\underline{\epsilon}}$. The material model required to evaluate $\underline{\underline{\sigma}}$ in the bulk as well as the surface traction $\underline{\underline{t}}$ at the GBs are defined below. The mean deformation mapping is defined as set in Ref. [60]

$$\underline{\underline{\tilde{\varphi}}} = \frac{1}{2}(\underline{\underline{\varphi}}^+ + \underline{\underline{\varphi}}^-) \quad (2.3)$$

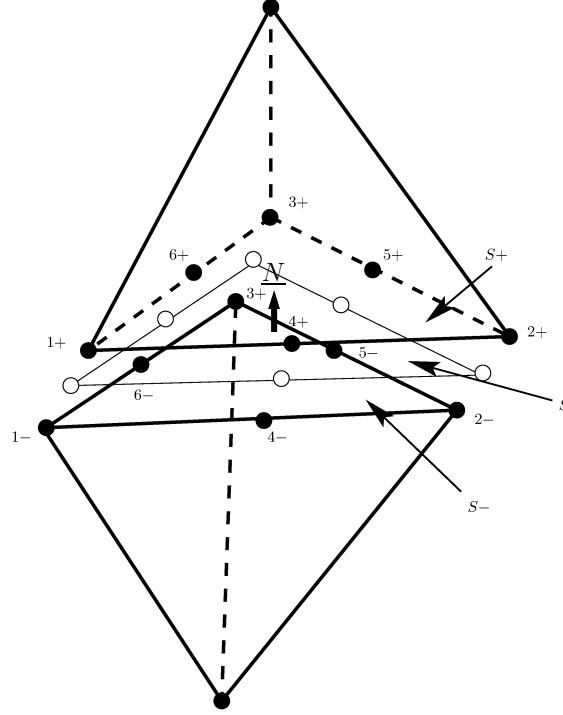


Figure 2.3: Schematics of a GB element. Two tetrahedra belonging to two adjacent crystals separated by an interface element at the GB: $S+$ and $S-$ are respectively the facets corresponding to the tetrahedra on the positive and negative sides, as defined by the positive surface normal \underline{N} , and S is the midsurface.

By using Equation (2.3) we recover the original deformation mapping on both sides of the GB

$$\underline{\varphi}^{\pm} = \tilde{\underline{\varphi}} \pm \frac{1}{2}(\underline{\varphi}^{+} - \underline{\varphi}^{-}) = \tilde{\underline{\varphi}} \pm \frac{1}{2}\underline{\delta} \quad (2.4)$$

where

$$\underline{\delta} = \llbracket \underline{\varphi} \rrbracket = \underline{\varphi}^{+} - \underline{\varphi}^{-} \quad (2.5)$$

is the displacement jump at the GB that can be decomposed into a GB opening vector and a sliding vector as follows

$$\underline{\delta}_n = (\underline{\delta} \cdot \underline{N})\underline{N} = (\underline{N} \otimes \underline{N}) \cdot \underline{\delta} \quad (2.6)$$

$$\underline{\delta}_s = \underline{\delta} - \underline{\delta}_n = (\underline{I} - \underline{N} \otimes \underline{N}) \cdot \underline{\delta} \quad (2.7)$$

This kinematics imposes a constant state of deformation across the thickness h of the GB, which can be expressed in the local orthonormal reference frame $(\underline{N}_1, \underline{N}_2, \underline{N})$, where \underline{N}_1 and \underline{N}_2 are the two local tangents. Thus the strain can be written as

$$\underline{\underline{\epsilon}} = \underbrace{\frac{\underline{\delta}_n \cdot \underline{N}}{h} \underline{N} \otimes \underline{N}}_{\underline{\underline{\epsilon}}_n} + \underbrace{\frac{\underline{\delta}_s \cdot \underline{N}_1}{h} \frac{1}{2} (\underline{N}_1 \otimes \underline{N} + \underline{N} \otimes \underline{N}_1) + \frac{\underline{\delta}_s \cdot \underline{N}_2}{h} \frac{1}{2} (\underline{N}_2 \otimes \underline{N} + \underline{N} \otimes \underline{N}_2)}_{\underline{\underline{\epsilon}}_s}$$

As shown in this latter equation, $\underline{\underline{\epsilon}}$ can be seen as the sum of two quantities; a normal opening part $\underline{\underline{\epsilon}}_n$ and a sliding part $\underline{\underline{\epsilon}}_s$. h naturally introduces a characteristic length scale of GBs in the model and is set to 1 nm following past works [94, 48]. This setting of h concerns only the first part of this thesis. The next study, presented in Section 3, includes some special considerations on the GB width treatment. The traction is eventually expressed as

$$\bar{\underline{t}} = h \underline{\underline{\sigma}} : \frac{\partial \underline{\underline{\epsilon}}}{\partial \underline{\underline{\delta}}} = \underline{\underline{\sigma}} \cdot \underline{N} \quad (2.8)$$

Only the sliding component undergoes plastic deformations and a damage parameter D is included in the GB opening mechanical behavior. The elasto-plastic model described in Ref. [39] is used to compute the sliding part $\underline{\underline{\sigma}}^{sl}$ of the effective stress tensor and is characterized by the yield stress tensor σ_p with

$$\sigma_p = \sigma_0 \left(1 + \frac{\bar{\epsilon}_p}{\epsilon_0}\right) \quad (2.9)$$

where $\bar{\epsilon}_p$ is the equivalent plastic strain, σ_0 is the initial yield stress, and ϵ_0 is the reference plastic strain. The damage parameter D is evaluated from the normal opening $\underline{\delta}_n \cdot \underline{N}$. While this opening remains relatively small, the opening stress $\underline{\underline{\sigma}}^{op}$ remains smaller in norm than the critical stress σ_c and $D = 0$. Once σ_c is reached, D increases in an irreversible way, and eventually reaches 1 for a critical opening δ_c . Finally the stress tensor is directly computed from

$$\underline{\underline{\sigma}} = (1 - D)(\underline{\underline{\sigma}}^{sl} + \underline{\underline{\sigma}}^{op}) \quad (2.10)$$

Because the constitutive behavior of one GB is based here on its ability to slide or open, the sliding and the opening behaviors are calibrated by shearing or by applying tensile loading to bicrystals designed with QC. Based on past QC studies, see Ref. [79, 80], the QC simulations achieved here account for the specific crystallography of each GB, see Figure 2.4. The shear modulus G , the yield stress σ_0 , the critical stress σ_c and the strain-to-failure δ_c are extracted from QC results and are used as inputs for the FEM.

These QC simulations enabled us to assert that σ_c and δ_c are higher in LABs than in HABs, giving new interesting insights on the specific natures of the GBs involved. This work demonstrates that a unique arbitrary law is not enough to capture the special nature of each GB, unlike the prevailing assumption made in past studies.

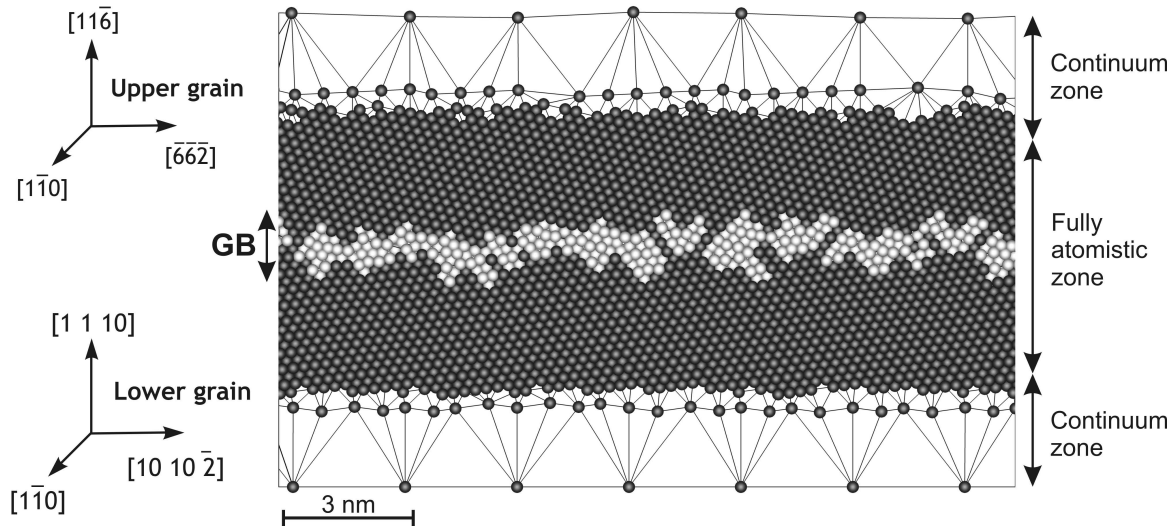


Figure 2.4: Quasicontinuum model of GB_{10-7} in the HA texture. The continuum and the atomistic regions are indicated. The crystals orientation and GB position after relaxation are also shown. Atoms appearing in dark color present a perfect FCC stacking. Bright-colored atoms correspond to crystal defects.

2.3 Two-scale numerical simulations

The two-scale model is aimed at predicting the mechanical behavior of NC solids and is calibrated in this work for copper in the case of two textures (HA and LA) and for two average grain sizes. Overall, with the RVE chosen consisting of 16 grains and 34 GBs, see Figure 2.5, 136 QC simulations (GB sliding, GB decohesion, interaction GB-dislocation) are required to fully calibrate the two-scale model to study two different textures and two different average grain sizes. The grain sizes and the textures have been chosen in order to illustrate the ability of the model to capture the RHP effect and its dependency on the texture considered.

Three kinds of calibration are considered to highlight the relative importance of the GB nature proportion in the deformation process. In the first model (set 1), grains are elastic, GB sliding is calibrated and GB decohesion is not taken into account. In the second one (set 2), grains are elastic and both GB sliding and opening are set. In the third set (set 3), intragranular plasticity is calibrated as well as GB sliding and GB decohesion. Tensile loading is applied for every set of simulations on the LA- and HA-type textured RVEs for different grain sizes. For every set of parameters, the same elastic behavior is observed and discrepancies appear with the plastic behavior. The resulting yield stresses decrease when going from set 1 to 3. In fact, the higher the number of constitutive mechanical laws inducing plasticity in the model, the earlier the plasticity. This demonstrates the need to consider an accurate constitutive behavior of both grains and GBs. A reduced material strength is also observed when the grain size decreases. The model shows here its ability to capture precisely the RHP effect predicted by atom-

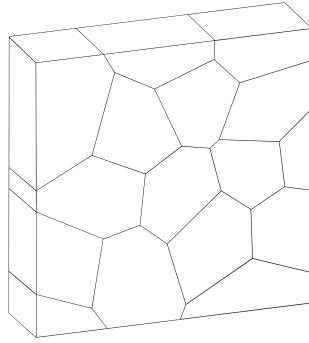


Figure 2.5: RVE consisting of 16 grains.

istic simulations. The LA textures are found to present longer elastic deformations and higher yield stresses than their HA counterparts. Because LABs present higher yield stresses, LA texture simulations allow for the competition between intragranular and intergranular plasticity to be captured. Conversely, HABs slip more easily due to their lower yield stresses and this makes difficult the identification of the activation of the intragranular plasticity in HA textures. Consequently, for such small grains, the model confirms the importance of taking into account the specific nature of the GB network to properly predict the NC behaviors.

The results are compared to MD results extracted from Ref. [84] and are found to be overvalued. This lies in the 2D nature of QC used for the calibration process and also because no thermally activated process is taken into account here. Nevertheless, even if some improvements are required to capture a good quantitative response, the model remains qualitatively efficient. Such a model opens the way to simulation frameworks able to automatically characterize GBs behaviors as a function of intergranular evolutions, while not necessarily fully modeling them. Such feature could be of crucial importance in the simulation of a recently discovered substitute for nanocrystals, namely nanotwinned ultrafine crystals.

The related article is given in Appendix A.

Chapter 3

Two-scale computational modeling of intergranular fracture in nanocrystalline copper.

This second part, taking the form of a paper submitted to the Computational Materials Journal, see Appendix B, is a direct continuation of the first Chapter [64]. In this study, the GB thickness h was arbitrarily set to 1 nm, following the previous studies addressing the GB thickness issue, see Ref. [94, 48]. Thus a finer GB calibration is achieved in this work through a more accurate determination of the GBs thicknesses. Then, the two-scale model is compared to a fully-atomistic QC model in order to validate it numerically. Finally, based on the trends of the GBs parameters presented in Ref. [64], a fitting process is presented in order to easily calibrate HA-type textured structures consisting of a large number of grains. This work also focuses on the ability of the model to predict the evolution of the intergranular fracture in NC metals.

3.1 GB width calibration

A more detailed observation of the GBs reveals that the widths of GBs are different depending on the nature of the GB considered. Based on a threshold of 0.1 for the centrosymmetry parameter p [40], helping measuring the degree of crystallinity of the FCC crystal lattice, the widths of GBs are determined for all the GBs involved in the previous Chapter. This GB thickness study allows for the identification of trends when considering GB thicknesses as a function of the GB misorientations. In order to test the sensitivity of the two-scale model to the GB width, tensile tests are performed on LA- and HA-type textured RVEs while averaging their GBs widths to 0.8 nm and 1.5 nm, respectively. The RVE used for this study is the same that was used in the previous Chapter.

It is found that averaging HAB widths in the HA-type textured RVE does not result in any significant change in the RVE behavior. Conversely, in the LA case, this averaging

leads to different behaviors concerning the propagation of the intergranular crack. In fact, due to the high variability observed in the case of the LA parameters, no fitting process seems to be appropriate to allow for the LA-type RVE behavior to be properly captured. However, in the HA case, trends are clear and not subjected to high variations. There, we apply a fitting process, as shown in Figure 3.1, that enables the obtention of the GB parameters according to their misorientations without having to compute all the GB simulations. In Figure 3.1(f), the initial CRSS g_0 of FCC slip systems as a function of the pseudo grain size h_{GB} as extracted from nanoindentation tests [64] is also reproduced to gather all the parameters required for NC simulations.

3.2 Numerical validation

The numerical validation of the two-scale model is then performed by comparing its predictions with a fully-atomistic model. To this end, we fully calibrate the two-scale model, meaning that σ_0 , G , σ_c , δ_c , h , g_0 are all calibrated from QC simulations (not from fitting process). The model validation is based on simulations addressing the behavior of 4 RVEs, LA- and HA-types, for two mean grain sizes. This model is illustrated in Figure 3.2 showing one HA-type texture presenting a mean grain size of 6.56 nm. It must be emphasized that performing fully-atomistic simulations with QC while properly relaxing the GBs is problematic because of the mixed nature (atomistic-continuum) of QC. These problems have been solved in the framework of this thesis and this must be seen as a novelty.

Then, we apply the same loading conditions for both models (two-scale and fully-atomistic) and the stress-strain curves as well as the deformed configurations are compared. The weak points of the GB networks are found to be the same in both models. Moreover, the paths followed by the intergranular cracks are quite similar, whatever the mean grain size or the nature of the GB networks. The stress-strain curves analysis reveals that both models predict the same trends concerning the texture yield stresses when decreasing the grain size, also called RHP effect. However, the two-scale model is found to be more rigid than the fully-atomistic model. This higher stiffness is believed to originate from the absence of triple junction calibration in the two-scale model.

3.3 Dogbone study

As a last step, and in order to illustrate the ability of the two-scale method to deal with larger problems, we study the mechanical response of a HA-type dogbone consisting of 103 grains and 251 GBs, see Figure 3.3. The calibration of the GBs (σ_0 , G , σ_c , δ_c , h) of the whole GB network is done by using the fitting process previously exposed. This study allows for the observation of the transition from an intergranular to an intragranular driven plasticity for small grain sizes. This highlights the crucial role played by both constitutive elements (grains and GBs) when grains are that small. This method is

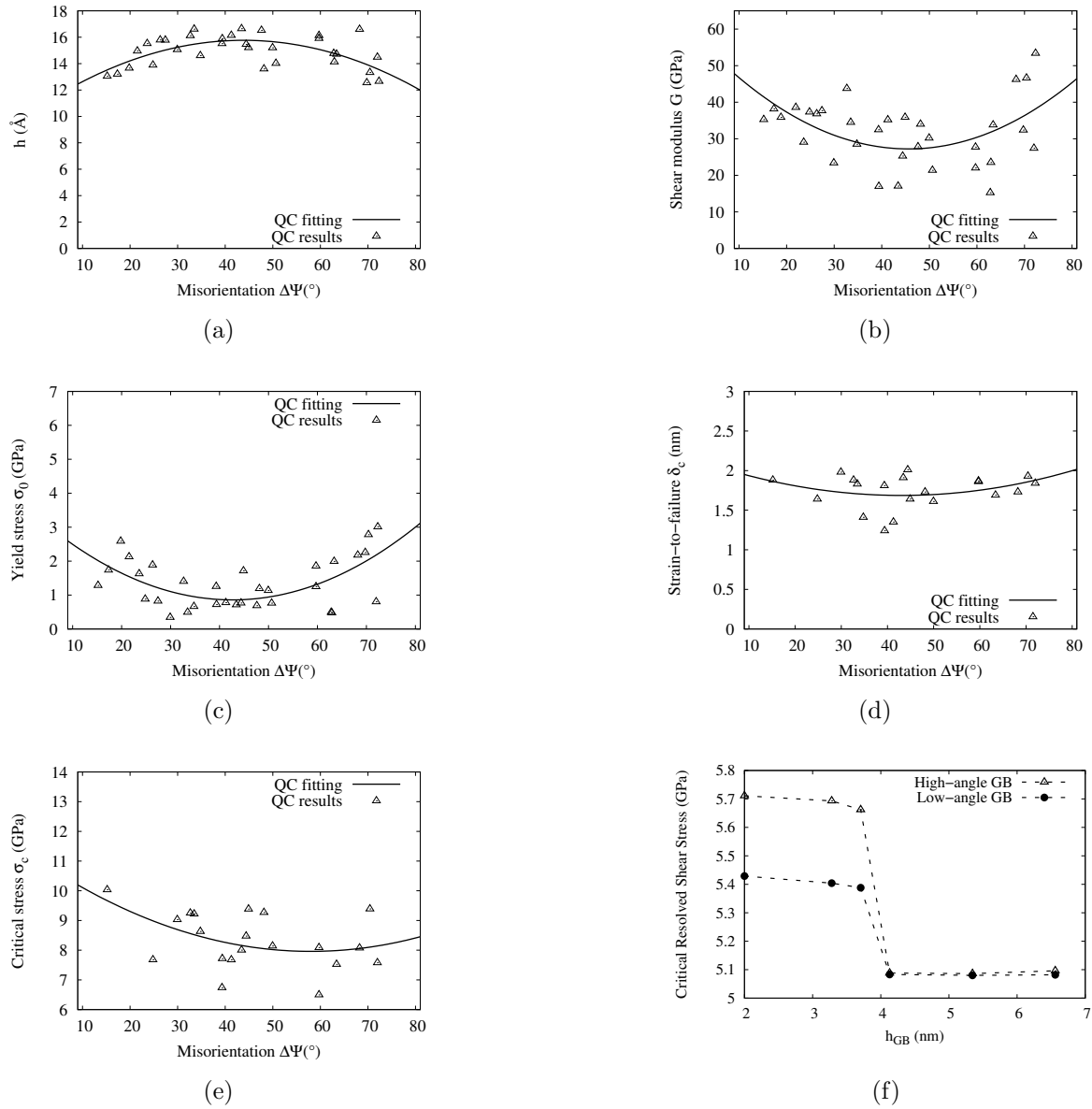


Figure 3.1: Fitting of GB parameters: a) h , b) G , c) σ_0 , d) δ_c , e) σ_c . f) CRSS (g_0) evolution with h_{GB} for HA and LA GBs.

adaptable to other tilt axes and opens the door to an exciting new approach to predict columnar thin film behaviors regardless of the number of grains consisting the sample.

To conclude, this part gives for the first time more accurate insights on the widths of the $[1, \bar{1}, 0]$ tilt GBs. It also reveals the sensitivity to the calibration process when dealing with LA-type textures or the possible fitting when addressing HA-type textures (fitting possible). Finally, this work highlights the importance of taking triple junctions into account in the two-scale framework. The calibration of such special elements of

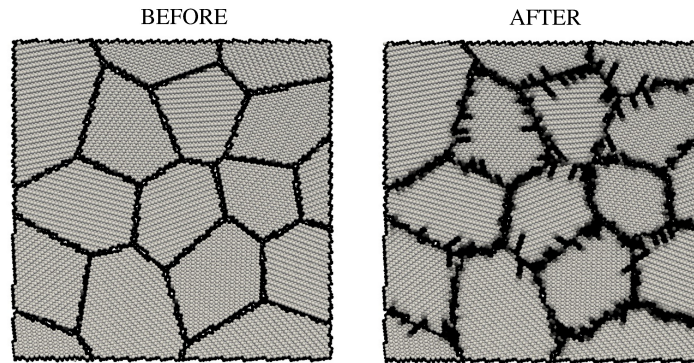


Figure 3.2: Fully-atomistic model in the case of the HA-type texture with a mean grain size of 6.56 nm, before and after relaxation step.

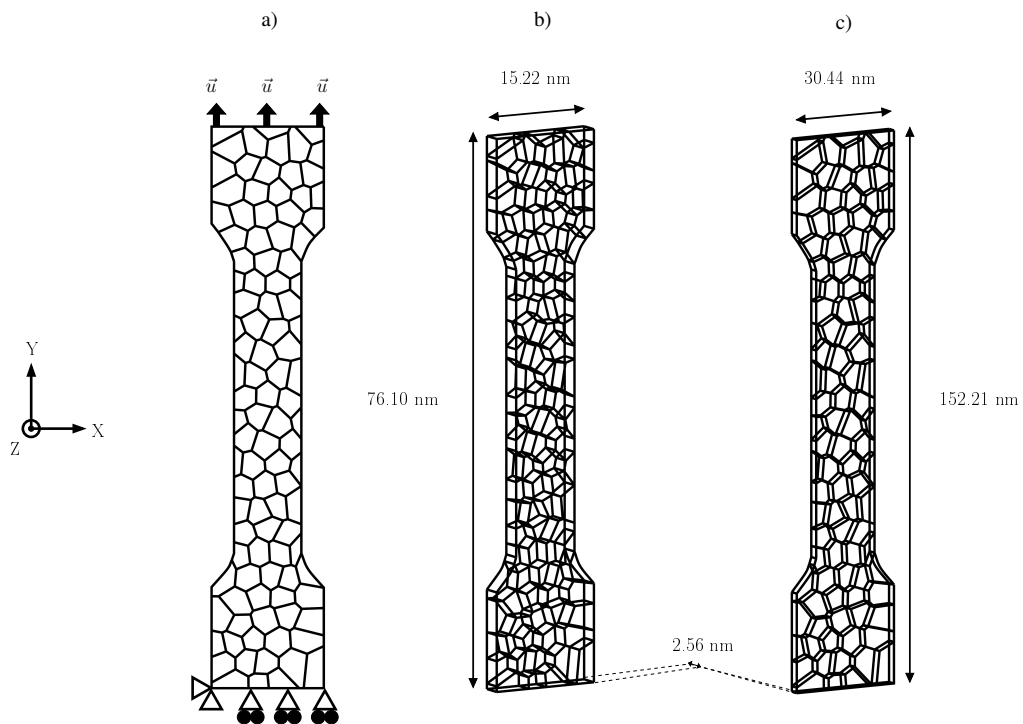


Figure 3.3: Boundary conditions and dogbone dimensions. a) Tensile loading boundary conditions. Nodes are fixed in the Z directions. Dimensions of dogbones with a grain size set to b) 3.28 nm and c) 6.56 nm.

the GB networks would help to reduce the overvaluation of the model in comparison to experiments and MD. This overvaluation lies also in the fact that no defects and thermally activated processes are accounted for in the model.

Chapter 4

Quasicontinuum study of the shear behavior of defective tilt grain boundaries in Cu

As we have seen in the two previous studies, the two-scale model results provided in the framework of this thesis are overvalued comparatively to the ones observed in fully-atomistic models whether statics (QC) or dynamics (MD), or more generally compared to experiments. In particular, the overvaluation concerning the GB yield stresses is partly due to the fact that the GBs do not include any defects, kinks or nano-scaled voids (nanovoids). The 2D nature of QC and the fact that our simulations do not take into account any thermally activated process also help to rationalize this overvaluation. In order to improve the two-scale model presented in Ref. [64,65], we choose as a first step to focus on the insertion of nanovoids within the GBs in hopes of identifying mechanical behaviors closer to reality.

4.1 Methodology

It has been shown that in pure tension, growth and coalescence of nanovoids smaller than a few nanometers in diameter can participate collectively in shear band formation and localized plastic deformation processes that result in significant material softening of metals [51, 16, 50, 77]. These nanovoids, present in metals, have been studied using MD technique and mixed atomistic/finite-element simulations [88, 73, 107, 109]. MD studies have focused on the dislocation dynamics in growth and coalescence of voids in single crystals [7]. In Ref. [25], interstitial atoms or vacancies were added inside GBs and showed multiple phases with different atomic structures. However, this latter study did not specifically address the impact of vacancies on the deformation processes and on the mechanical response of GBs. NC GBs have been predicted to exhibit characteristic deformation processes. There are three of these: GB-mediated dislocation emission (process 1) [98, 46, 83, 81], interface sliding (process 2) [82, 98, 97, 78, 17, 81] and shear-

coupled GB migration (process 3) [76, 5, 28, 49, 74, 17]. In the process 1, the plastic flow under mechanical loading is accommodated by dislocation emission from the periodic defects of the GB. In the second process, the accommodation is due to atomic shuffling, i.e. by inhomogeneous displacements of an array of atoms in the layers immediately adjacent to the GB. Finally, in the third process, shear-coupled GB migration corresponds to a deformation process for which the crystalline interface is displaced in the direction perpendicular to the GB plane when subjected to pure shear loading along its tangential direction. Thus the aim of this study is to determine the influence of nanovoids on the deformation processes cited above. Five tilt bicrystals containing GBs are chosen as witnesses of these three processes. These GBs are submitted to shear tests with QC, as in Ref. [79, 80], while varying the void volume concentration inside them. Process 1 is represented by one HAB and one LAB. Process 2 corresponds to $\Sigma 9(221)$. Finally, process 3 is studied through $\Sigma 27(115)$ and $\Sigma 5(210)$ GBs.

To this end, the model presented in Ref. [79, 80] is implemented in order to allow for the insertion of nanovoids in GBs. This implementation offers the possibility to vary the number and the diameter of the nanovoids inserted, which is the same as varying the void volume concentration in the GBs. The QC modeling is illustrated in Figure 4.1.

4.2 Results

The interfacial shear strengths experienced at the yield point by the bicrystals undergoing shearing are extracted from these defective GBs simulations, as it can be seen for perfect tilt GBs in Figure 4.2. We show that for all GBs, the interfacial shear strength decreases as the void volume fraction at the interface increases, see Figure 4.3. Different deformation nanomechanisms depending upon the number and size of the nanovoids, and upon the process involved, are found compared to the case of non-defective GBs. For process 1, i.e. in the GB-mediated dislocation emission case, dislocations are found to be preferentially emitted from voids, instead of intrinsic GB sites; more so in the LAB interface than in the HAB interface. Also, nanovoids are found to act as pinning points that impede atom shuffling across the interfaces for the process 2. In the case of the third process, the effect of nanovoids on shear-coupled migration is found to depend on the GB type. In the $\Sigma 5(210)$ GB, migration is not significantly affected and no dislocation emission is observed. On the contrary, $\Sigma 27(115)$ GB undergoes significant perturbations in its migration and preferentially emits dislocations when voids become larger.

4.3 Model

We then develop a model aiming at describing the decrease of the interfacial shear strength σ_{max} as a function the void volume concentration V . The proposed expression

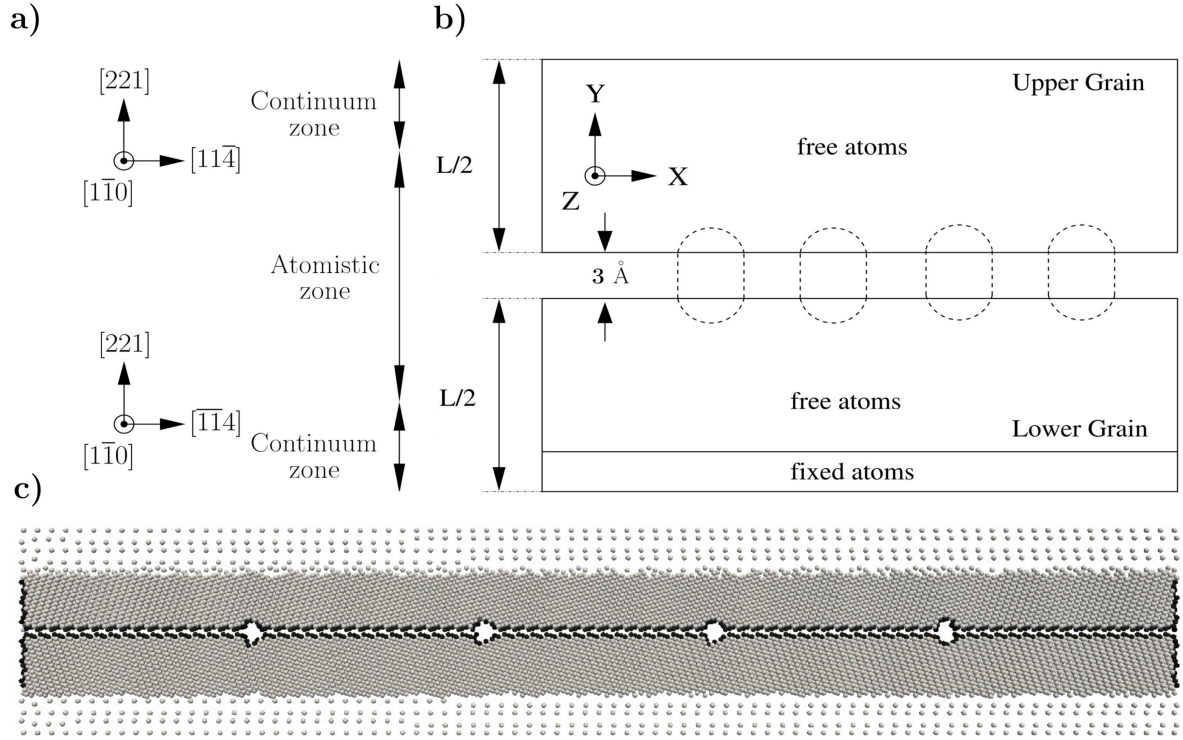


Figure 4.1: Quasicontinuum modeling of a tilt bicrystals containing nanovoid defects at the interface. a) Schematics of atomistic and continuum zones, and crystal orientations for a $\Sigma 9(221)$ GB. b) Boundary conditions for zero force lattice relaxation used to simulate 0 K equilibrium GB structures. Voids are represented with dashed lines. c) Atomistic snapshot before relaxation for a $\Sigma 9(221)$ GB in Cu with a void volume fraction equal to 1.48% (4 voids, diameter 10 Å). Bright-colored atoms are in perfect FCC crystal lattice (zero centrosymmetry). Dark-colored atoms are part of crystal defects (non-zero centrosymmetry).

takes the following form

$$\sigma_{max} = (1 - V) * \sigma_{max_0} + V * \sigma_v \quad (4.1)$$

where σ_{max_0} is the interfacial shear strength when no nanovoid is present (perfect GB). The missing parameter, σ_v , is a residual stress acting in the vicinity of the defect and is evaluated by rewriting equation (4.1) in

$$\frac{\sigma_{max}}{\sigma_{max_0}} = 1 - V * \left(1 - \frac{\sigma_v}{\sigma_{max_0}}\right) \quad (4.2)$$

so that the results for each GB can be represented as in the Figure 4.3 which shows the slope for each GB and highlights the relative values of σ_v . According to the model,

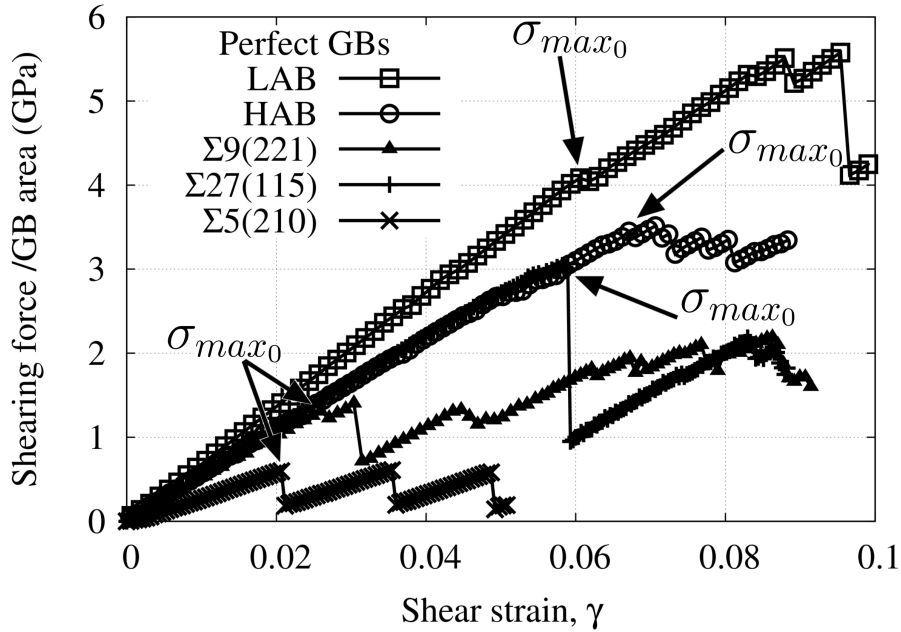


Figure 4.2: Shear stress *vs.* γ curves for different GBs (LAB, HAB, $\Sigma 9(221)$, $\Sigma 27(115)$, $\Sigma 5(210)$) in Cu in the absence of voids. σ_{max_0} is the maximum stress reached by all GBs without voids at the plastic deformation onset.

represented by Equation (4.2), σ_v is found to be negative, i.e. found to be responsible for a shield effect to the applied stress. In order to illustrate this finding, the virial stresses at the atomic level are computed. The virial stresses analysis in the vicinity of the nanovoids reveals a perfect correlation between the virial stresses and the σ_v values shown in Figure 4.4. This result confirms the existence of a stress concentration in the nanovoids vicinity, acting against the applied stress, and showing different values depending on the nature of the process (1, 2 or 3) involved.

The model presented here is a first step in understanding the effect of nanovoids defects on the GBs of NCs. It is now possible to determine the laws ruling the yield stress decrease as a function of the void volume concentration when the process involved is established. This model, although not yet used in the two-scale framework, will allow for the reduction of the overvaluation encountered while using the atomistic simulation calibration.

The corresponding study, published in *Acta Materialia*, is reproduced in Appendix C.

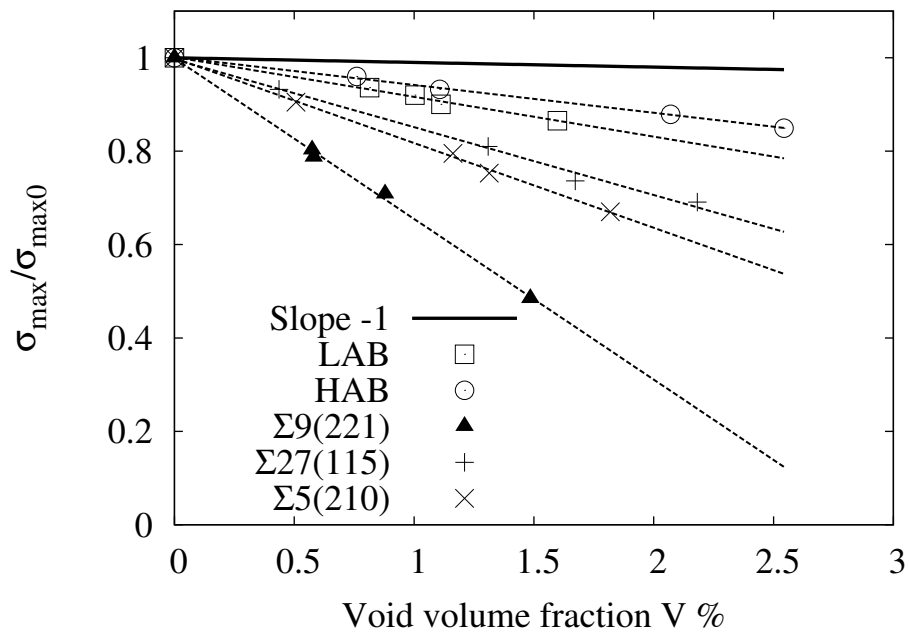


Figure 4.3: Fitting of $\sigma_{max}/\sigma_{max0}$ vs. void volume fraction V by equation (4.2) (dashed lines). The model predictions with no void-induced stress ($\sigma_v = 0$) are shown with a solid line for comparison.

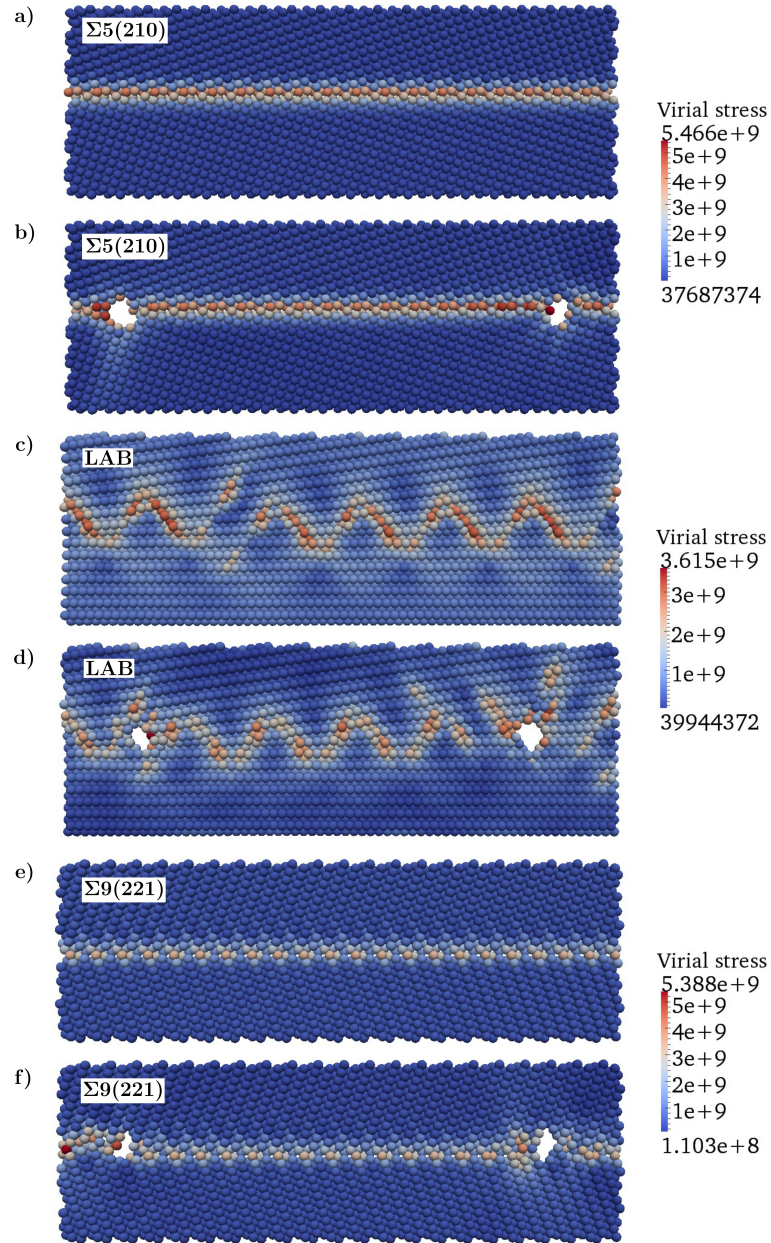


Figure 4.4: Virial stress (von Mises) (Pa) snapshots (partial views of the GBs) before yield point when a) no void and b) voids are inserted in a $\Sigma 5(210)$ GB. c) and d) same analysis for a LAB interface. e) and f) ditto for a $\Sigma 9(221)$ GB.

Chapter 5

Conclusions

The aim of this thesis was to develop a two-scale numerical model, atomistically-informed, able to predict the mechanical behavior of NC metals as a function of their particular crystallography. Generally adaptable to FCC and BCC solids and enhancing the understanding of NCs, this method does not suffer from length-scale limitations conventionally encountered when studying NCs with atomistic methods. The challenge taken up in the framework of this thesis has been to numerically calibrate the material laws governing the constitutive elements, grains and GBs, from QC atomistic simulations.

Laws governing the GB sliding and GB opening were based on QC simulations of oriented bicrystals undergoing shear and tensile loadings, respectively. In addition, these simulations provided the trends of the HABs parameters allowing for an easier calibration of the HA-type textures, through a fitting process as a function of the misorientation. Conversely, these GB simulations highlighted the difficulties faced when dealing with LABs. In this last case, LABs parameters are subjected to large variations when considering them as a function of their misorientations, making the fitting process impossible.

The grains behaviors were described by a forest dislocation hardening model that has been calibrated using nanoindentation QC simulations. The determination of the initial critical resolved shear stresses resulting from QC simulations allowed to highlight not only the grain-size effect, but also its dependency with the nature of the texture considered.

The QC calibration of the constitutive elements of the FEM has allowed us to capture the competition taking place between intragranular and intergranular plasticity behaviors in NCs metals, depending on the grain size considered giving rise in particular to the RHP effect. In this way, the model demonstrated its ability to predict the NCs behaviors when varying the mean grain size and/or the GBCD. Moreover, the model was able to predict not only the GB networks weak points but also the direction of the intergranular crack propagation. We have also noted however that taking triple junctions into account is a possible way to improve the ability of the model to predict the crack propagation direction.

Based on the trends of the GBs parameters fully characterized using QC, a fitting process was presented in order to simplify the HA-type texture calibration, allowing for the simulations of samples consisting of a substantial number of grains and avoiding the need for extra QC simulations.

Finally, the absence of GBs defects in the GB simulations led to results quantitatively overvalued compared to experiments and fully-atomistic models. To solve this problem, an original study has been carried out on the insertion of nanovoids in the GB simulations. This study showed that the introduction of nanovoids in GBs subjected to shear loading results in a significant GB softening leading to a linear decrease of the yield strength with respect to the void volume fraction. This decrease has been found to depend on the deformation mechanism involved in the defective GB. This last study must be seen as a first step toward the improvement of the predictions of the model when accounting for NC defects.

Chapter 6

Perspectives

The presented two-scale numerical model suffers from the limitations inherent to the QC method. Due to the 2D nature of the available QC software, the method is therefore limited to 2D problems at 0K temperature and when only one GB tilt direction is considered. In other words, this method is applicable to columnar thin films in the case of 0K static equilibrium problems. The two-scale model is however more general even if limited here by the QC hypotheses.

The introduction of nanovoids within the GBs, which constitutes a first step aiming at improving the two-scale model, is not the only defect that should be taken into account. In fact, incorporating kink step defects in GBs would be a very interesting way to improve the model. Auguring futur publications, the first simulation of a GB consisting of one kink has already been undertaken. The illustration of this kink step added in a twin boundary (TB) is given in Figure 6.1. Both TBs, with and without kink step, were subjected to shear loading in the same way as seen previously in Ref. [66]. The curves given in Figure 6.2 were extracted from these simulations in order to evaluate the influence of one kink step on the GB structure. It is found that the interfacial shear strength decreases when the kink is inserted. In short and in the same way as it has been already done in the nanovoids case [66], it should be possible to determine the elasto-plastic laws governing the GBs as a function not only on the kink step concentration but also according to the GB mechanisms involved in the deformation. The resulting new GB laws, corresponding to a decrease of the GB interfacial shear strength, would certainly help leveling the overvaluation problem encountered in the two-scale model presented in this work.

Also, adding calibrated triple junction elements in the continuum should be possible and would allow for a better crack propagation predictions in NCs.

Finite temperature QC, also sometimes referred to “hot-QC method”, and able to deal with 3D problems is currently under development by the community. In addition, a recent study [42], which presents a version of the QC code called “Hyper-QC method”, is an accelerated finite-temperature QC method enabling longer time scale simulations by coupling the hot-QC with hyperdynamics, already used in MD simulations. The whole two-scale method could thus be recalibrated using the last QC version to integrate the

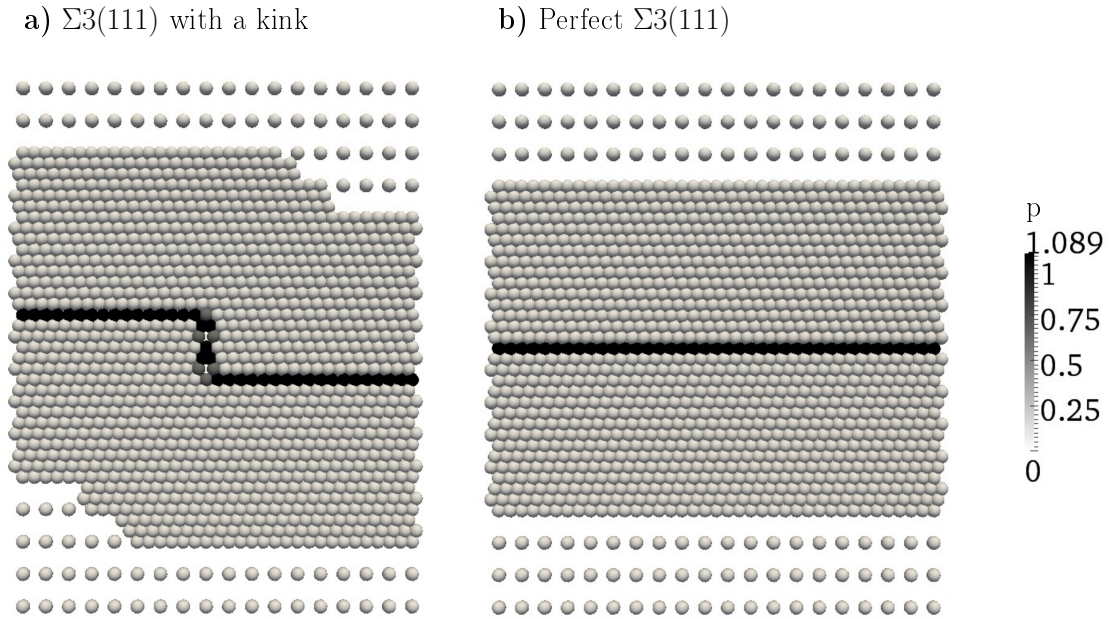


Figure 6.1: QC snapshots of Copper $\Sigma 3(111)$ TB. a) A kink is present. b) Perfect TB. Atoms in bright color have perfect FCC crystal stacking, while dark color atoms correspond to crystal defects.

impact of temperature and 3D effects that are not taken into account in the framework of this work.

The model of plasticity included in the model is a local model, based on the glide of dislocations, for which the grain size effect is taken into account during the calibration process by varying the distance between the indented surface and the GB of the nanoindentation model. The models, presented in Ref. [38, 32, 33, 12, 59], incorporate a dependency on the plastic strain gradients and are capable of capturing size-dependent behavior of metals at the micron scale. Considering these latter non-local frameworks would help to improve the grain plasticity in our two-scale approach.

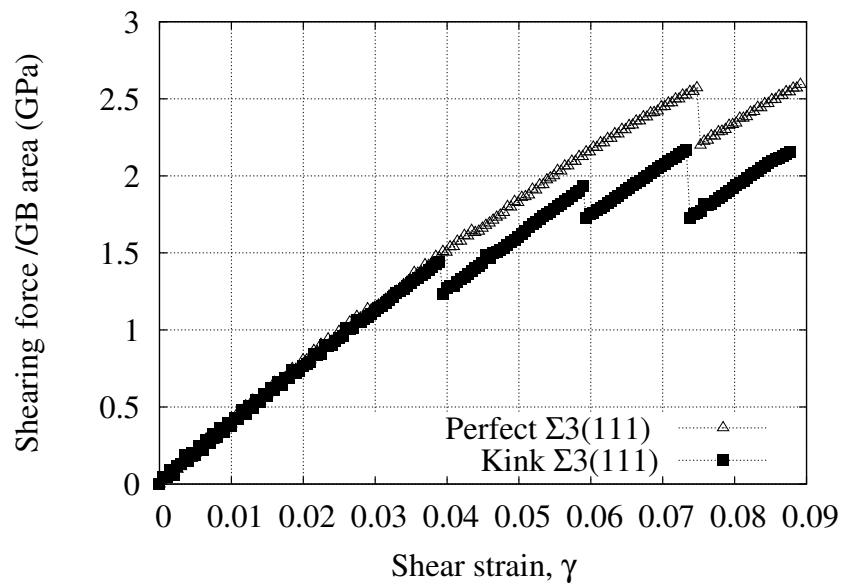


Figure 6.2: Evolution of the shear stress as a function of the applied shear strain for perfect and defective $\Sigma 3(111)$ TBs.

Bibliography

- [1] ALDER, B. J., AND WAINWRIGHT, T. E. Studies in molecular dynamics. i. general method. *The Journal of Chemical Physics* 31, 2 (1959).
- [2] BENEDETTI, I. The boundary element method: Applications in solids and structures. *John Wiley & Sons Ltd., England, vol. 2* (2002).
- [3] BENEDETTI, I., AND ALIABADI, M. H. A three-dimensional cohesive-frictional grain-boundary micromechanical model for intergranular degradation and failure in polycrystalline materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 265 (2013), 36–62.
- [4] BREWER, L. N., OTHON, M. A., YOUNG, L. M., AND ANGELIU, T. M. Misorientation mapping for visualization of plastic deformation via electron back-scattered diffraction. *Microscopy and Microanalysis* 12 (2006), 85–91.
- [5] CAHN, J. W., MISHIN, Y., AND SUZUKI, A. Coupling grain boundary motion to shear deformation. *Acta Materialia* 54 (2006), 4953–4975.
- [6] CAO, A. J., AND WEI, Y. G. Atomistic simulations of crack nucleation and intergranular fracture in bulk nanocrystalline nickel. *Physical Review B* 76 (2007), 024113.
- [7] CHANGWEN, M., BUTTRY, D. A., SHARMA, P., AND KOURIS, D. A. Atomistic insights into dislocation-based mechanisms of void growth and coalescence. *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 59 (2011), 1858–1871.
- [8] CHEN, J., LU, L., AND LU, K. Hardness and strain rate sensitivity of nanocrystalline cu. *Scripta Materialia* 54 (2006), 1913–1918.
- [9] CRAWFORD, D. C., AND WAS, G. S. The role of grain boundary misorientation in intergranular cracking of $Ni_{16}Cr_9Fe$ in 360°C argon and high-purity water. *Metallurgical and Materials Transactions A* 23 (1992), 1195–1206.
- [10] CROCKER, A. G., FLEWITT, P. E. J., AND SMITH, G. E. Computational modelling of fracture in polycrystalline materials. *International Materials Review* 27 (2005), 99–125.

-
- [11] CUITIÑO, A. M., AND ORTIZ, M. Computational modelling of single crystals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 1* (1993), 225–263.
- [12] DAHLBERG, C. F., AND FALESKOG, J. Strain gradient plasticity analysis of the influence of grain size and distribution on the yield strength in polycrystals. *European Journal of Mechanics - A/Solids 44*, 0 (2014), 1–16.
- [13] DALLA TORRE, F., SPÄTIG, P., SCHÄUBLIN, R., AND VICTORIA, M. Deformation behaviour and microstructure of nanocrystalline electrodeposited and high pressure torsioned nickel. *Acta Materialia 53*(8) (2005), 2337–2349.
- [14] DE HOSSON, J. T. M., PALASANTZAS, G., VYSTAVEL, T., AND KOCH, S. Nanosized metal clusters: Challenges and opportunities. *Journal of Materials* (2004), 40–45.
- [15] DOBSON, M., ELLIOTT, R., LUSKIN, M., AND TADMOR, E. A multiplicative quasicontinuum for phase transforming materials: cascading cauchy born kinematics. *Journal of Computer-Aided Materials Design* (2007).
- [16] DONOVAN, P. E., AND STOBBS, W. M. The shear band deformation process in microcrystalline $Pd_{80}Si_{20}$. *Acta Metallurgica 31* (1983), 1–8.
- [17] DUPONT, V., AND SANSOZ, F. Quasicontinuum study of incipient plasticity under nanoscale contact in nanocrystalline aluminum. *Acta Materialia 56* (2008), 6013–6026.
- [18] DUPUY, L. M., TADMOR, E. B., MILLER, R. E., AND PHILLIPS, R. Finite temperature quasicontinuum: molecular dynamics without all atoms. *Physical Review Letters 95* (2005), 060202.
- [19] EL-SHERIK, A. M., AND ERB, U. Synthesis of bulk nanocrystalline nickel by pulsed electrodeposition. *Journal of Materials Science 30* (1995), 5743–5749.
- [20] FLECK, N., AND HUTCHINSON, J. A reformulation of strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids 49*, 10 (2001), 2245–2271.
- [21] FOILES, S. M., BASKES, M. I., AND DAW, M. S. Embedded-atom method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt , and their alloys. *Physical Review B 33* (1986), 7983–7991.
- [22] FOUGERE, G. E., SIEGEL, R. W., WEERTMAN, J. R., AND KIM, S. Grain-size dependent hardening and softening of nanocrystalline cu and pd. *Scripta Metallurgica 26* (1992).

- [23] FRESSENGEAS, C., TAUPIN, V., AND CAPOLUNGO, L. An elasto-plastic theory of dislocation and disclination fields. *International Journal of Solids and Structures* 48, 25-26 (2011), 3499–3509.
- [24] FRESSENGEAS, C., TAUPIN, V., UPADHYAY, M., AND CAPOLUNGO, L. Tangential continuity of elastic/plastic curvature and strain at interfaces. *International Journal of Solids and Structures* 49, 18 (2012), 2660–2667.
- [25] FROLOV, T., OLMSTED, D. L., ASTA, M., AND MISHIN, Y. Structural phase transformations in metallic grain boundaries. *Nature Communications* (2013).
- [26] FU, H. H., BENSON, D. J., AND MEYERS, M. A. Analytical and computational description of effect of grain size on yield stress of metals. *Acta Materialia* 49 (2001), 2567–2582.
- [27] FU, H. H., BENSON, D. J., AND MEYERS, M. A. Computational description of nanocrystalline deformation based on crystal plasticity. *Acta Materialia* 52 (2004), 4413–4425.
- [28] GIANOLA, D. S., VAN PETEGEM, S., LEGROS, M., BRANDSTETTER, S., VAN SWYGENHOVEN, H., AND HEMKER, K. J. Stress-assisted discontinuous grain growth and its effect on the deformation behavior of nanocrystalline aluminum thin films. *Acta Materialia* 54 (2006), 2253–2263.
- [29] GLEITER, H. Nanocrystalline materials. *Progress in Materials Science* 33 (1989), 223–315.
- [30] GLEITER, H. Nanostructured materials: basic concepts and microstructure. *Acta Materialia* 48 (1999), 1–29.
- [31] GURTIN, M. E. The burgers vector and the flow of screw and edge dislocations in finite-deformation single-crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 54, 9 (2006), 1882–1898.
- [32] GURTIN, M. E., AND ANAND, L. A theory of strain-gradient plasticity for isotropic, plastically irrotational materials. part i: Small deformations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 53, 7 (2005), 1624–1649.
- [33] GURTIN, M. E., AND REDDY, B. D. Gradient single-crystal plasticity within a mises-hill framework based on a new formulation of self- and latent-hardening. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 0 (2014), –.
- [34] HALL, E. O. The deformation and ageing of mild steel: 3 discussion of results. *Proceedings of the physical Society. Section B* 64 (1951), 747.
- [35] HIRTH, J. P., AND LOTHE, J. Theory of dislocations. *McGraw-Hill, New York* (1968).

- [36] HUGHES, G. M., SMITH, G. E., FLEWITT, P. E. J., AND CROCKER, A. G. The brittle fracture of polycrystalline zinc. *International Materials Review* 463 (2007), 2129–2151.
- [37] HUGHES, T. J. *The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis*. Courier Dover Publications, 2012.
- [38] HUTCHINSON, J. Generalizing j2 flow theory: Fundamental issues in strain gradient plasticity. *Acta Mechanica Sinica* 28, 4 (2012), 1078–1086.
- [39] JÉRUSALEM, A., STAINIER, L., AND RADOVITZKY, R. A continuum model describing the reverse grain-size dependence of the strength of nanocrystalline metals. *Philosophical Magazine* 87 (2007), 2541–2559.
- [40] KELCHNER, C. L., PLIMPTON, S. J., AND HAMILTON, J. C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation. *Physical Review B* 60 (1998), 11085–11088.
- [41] KIM, H. S., ESTRIN, Y., AND BUSH, M. B. Plastic deformation of fine-grained materials. *Acta Materialia* 48 (2000), 493–504.
- [42] KIM, W., LUSKIN, M., PEREZ, D., VOTER, A., AND TADMOR, E. Hyper-qc: An accelerated finite-temperature quasicontinuum method using hyperdynamics. *JMPS* 63, 0 (2014), 94 – 112.
- [43] KOKAWA, H., WATANABE, T., AND KARASHIMA, S. Sliding behaviour and dislocation structures in aluminium grain boundaries. *Philosophical Magazine A* 44 (1981).
- [44] KRAFT, R. H., MOLINARI, J. F., RAMESH, K. T., AND WARNER, D. H. Computational micromechanics of dynamic compressive loading of a brittle polycrystalline material using a distribution of grain boundary properties. *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 56 (2008), 2618–2641.
- [45] KUCHNICKI, S. N., CUITIÑO, A. M., AND RADOVITZKY, R. A. Efficient and robust constitutive integrators for single-crystal plasticity. *International Journal of Plasticity* 36 (2006), 1.
- [46] KUMAR, K. S., VAN SWYGENHOVEN, H., AND SURESH, S. Deformation of electrodeposited nanocrystalline nickel. *Acta Materialia* 51 (2003), 387–405.
- [47] KUMAR, K. S., VAN SWYGENHOVEN, H., AND SURESH, S. Mechanical behavior of nanocrystalline metals and alloys. *Acta Materialia* 51(19) (2003), 5743–5774.
- [48] KUNG, H., SANDERS, P. G., AND WEERTMAN, J. R. Transmission electron microscopy characterization of nanocrystalline copper. *Advanced Materials for the twenty-first Century* (1999), 455–463.

- [49] LEGROS, M., GIANOLA, D. S., AND HEMKER, K. J. In situ tem observations of fast grain-boundary motion in stressed nanocrystalline aluminum films. *Acta Materialia* 56 (2008), 3380–3393.
- [50] LI, J., WANG, Z. L., AND HUFNAGEL, T. C. Characterization of nanometer-scale defects in metallic glasses by quantitative high-resolution transmission electron microscopy. *Physical Review B* 65 (2002), 144201–1 144201–6.
- [51] LI, Y. S., TAO, N. R., AND LU, K. Microstructural evolution and nanostructure formation in copper during dynamic plastic deformation at cryogenic temperatures. *Acta Materialia* 56 (2008), 230–241.
- [52] LIN, P., PALUMBO, G., ERB, U., AND AUST, K. T. Influence of grain boundary character distribution on sensitization and intergranular corrosion of alloy 600. *Scripta Metallurgica and Materialia* 33(9) (1995), 1387–1392.
- [53] LU, K., AND LU, J. Nanostructured surface layer on metallic materials induced by surface mechanical attrition treatment. *Materials Science and Engineering A* (2004), 38–45.
- [54] LU, L., SHEN, Y., CHEN, X., QIAN, L., AND LU, K. Ultrahigh strength and high electrical conductivity in copper. *Science* 15 (2004), 422–6.
- [55] LU, L., WANG, L. B., DING, B. Z., AND LU, K. High-tensile ductility in nanocrystalline copper. *Journal of Materials Research* 15 (2000), 270–3.
- [56] MILLER, R., AND TADMOR, E. B. The quasicontinuum method: overview, applications and current directions. *Journal of Computer-Aided Materials Design* 9 (2002), 203–239.
- [57] MÜHLHAUS, H.-B., AND AIFANTIS, E. A variational principle for gradient plasticity. *International Journal of Solids and Structures* 28, 7 (1991), 845–857.
- [58] NATTER, H., SCHMELZER, M., AND HEMPELMANN, R. Nanocrystalline nickel and nickel-copper alloys: Synthesis, characterization, and thermal stability. *Journal of Materials Research* 13 (1998), 1186–1197.
- [59] NIORDSON, C. F., AND KYSAR, J. W. Computational strain gradient crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 62, 0 (2014), 31–47. Sixtieth anniversary issue in honor of Professor Rodney Hill.
- [60] ORTIZ, M., AND PANDOLFI, A. Finite-deformation irreversible cohesive elements for three-dimensional crack-propagation analysis. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 44 (1999), 1267.
- [61] ORTIZ, M., AND POPOV, E. P. A statistical theory of polycrystalline plasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 90 (1982).

- [62] PALUMBO, G., AND AUST, K. T. Structure-dependence of intergranular corrosion in high purity nickel. *Acta Metallurgica and Materialia* 38 (1990), 2343–2352.
- [63] PEIRCE, D., ASARO, R., AND NEEDLEMAN, A. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta Metallurgica* 30, 6 (1982), 1087–1119.
- [64] PÉRON-LÜHRS, V., JÉRUSALEM, A., SANSOZ, F., STAINIER, L., AND NOELS, L. A two-scale model predicting the mechanical behavior of nanocrystalline solids. *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 61 (2013), 1895–1914.
- [65] PÉRON-LÜHRS, V., SANSOZ, F., JÉRUSALEM, A., AND NOELS, L. Two-scale computational modeling of intergranular fracture in nanocrystalline metals: Validation and application to low-angle and high-angle textures in nanocrystalline copper. *Computational Materials Science, Under review* (2014).
- [66] PÉRON-LÜHRS, V., SANSOZ, F., AND NOELS, L. Quasicontinuum study of the shear behavior of defective tilt grain boundaries in cu. *Acta Materialia* 64 (2014), 419–428.
- [67] PETCH, N. J. The cleavage strength of crystals. *Journal of Iron Steel Institute* 174 (1953), 25–28.
- [68] RACK, H. J., AND COHEN, M. Strain hardening of iron-titanium alloys at very large strains. *Materials Science and Engineering* 6 (1970), 320–326.
- [69] RANDLE, V. Twinning-related grain boundary engineering. *Acta Materialia* 52 (2004), 4067–4081.
- [70] RANDLE, V. Special boundaries and grain boundary plane engineering. *Scripta Materialia* 54, 6 (2006), 1011–1015. Viewpoint set no. 40: Grain boundary engineering.
- [71] RODNEY, D., AND PHILLIPS, R. Structure and strength of dislocation junctions: an atomic level analysis. *Physical Review Letters* 82(8) (1999), 1704–1707.
- [72] ROTERS, F., EISENLOHR, P., HANTCHERLI, L., TJAHHANTO, D., BIELER, T., AND RAABE, D. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications. *Acta Materialia* 58, 4 (2010), 1152–1211.
- [73] RUDD, R., AND BELAK, J. Void nucleation and associated plasticity in dynamic fracture of polycrystalline copper: an atomistic simulation. *Computational Materials Science* 24 (2002), 148–153.

- [74] RUPERT, T. J., GIANOLA, D. S., GAN, Y., AND HEMKER, K. J. Experimental observations of stress-driven grain boundary migration. *Science* 326 (2009), 1686–1690.
- [75] SAILOR, D. M., MORAWIEC, A., ADAMS, B. I., AND ROHRER, G. S. Misorientation dependence of the grain boundary energy in magnesia. *Interface Science* 8 (2000), 131–140.
- [76] SANSOZ, F., AND DUPONT, V. Grain growth behavior at absolute zero during nanocrystalline metal indentation. *Applied Physics Letters* 89 (2006).
- [77] SANSOZ, F., AND DUPONT, V. Atomic mechanism of shear localization during indentation of a nanostructured metal. *Materials Science and Engineering C* 27 (2007), 1509–1513.
- [78] SANSOZ, F., AND DUPONT, V. Nanoindentation and plasticity in nanocrystalline ni nanowires: A case study in size effect mitigation. *Scripta Materialia* 63 (2010), 1136–1139.
- [79] SANSOZ, F., AND MOLINARI, J. F. Incidence of atom shuffling on the shear and decohesion behavior of a symmetric tilt boundary in copper. *Scripta Materialia* 50 (2004), 1283–1288.
- [80] SANSOZ, F., AND MOLINARI, J. F. Mechanical behavior of Σ tilt grain boundaries in nanoscale *Cu* and *Al*: A quasicontinuum study. *Acta Materialia* 53 (2005), 1931–1944.
- [81] SANSOZ, F., AND STEVENSON, K. D. Relationship between hardness and dislocation processes in a nanocrystalline metal at the atomic scale. *Physical Review B* 83 (2011), 224101–1 224101–9.
- [82] SCHIØTZ, J., DI TOLLA, F. D., AND JACOBSEN, K. W. Softening of nanocrystalline metals at very small grain sizes. *Nature* 391 (1998).
- [83] SCHIØTZ, J., AND JACOBSEN, K. W. A maximum in the strength of in nanocrystalline copper. *Science* 301 (2003).
- [84] SCHIØTZ, J., VEGGE, T., DI TOLLA, F. D., AND JACOBSEN, K. W. Atomic-scale simulations of nanocrystalline metals. *Physical Review B* 60 (1999), 11971.
- [85] SCHWAIGER, R., MOSER, B., AND DAO, M. Some critical experiments on the strain-rate sensitivity of nanocrystalline nickel. *Acta Materialia* 51 (2003), 5159–5172.
- [86] SHIGEMATSU, N., PRIOR, D. J., AND WHEELER, J. First combined electron backscatter diffraction and transmission electron microscopy study of grain boundary structure of deformed quartzite. *Journal of Microscopy* 224 (2006), 306–321.

- [87] SHVINDLERMAN, L., AND STRAUMAL, B. Regions of existence of special and non-special grain boundaries. *Acta Metallurgica* 33, 9 (1985), 1735 – 1749.
- [88] STRACHAN, A., CAGIN, T., AND GODDARD, W. Critical behavior in spallation failure of metals. *Physical Review B* 63 (2001).
- [89] SZEFER, G., AND JASIŃSKA, D. Modeling of strains and stresses of material nanostructures. *Bulletin of the Polish academy of sciences, technical sciences* 57 (2009).
- [90] TADMOR, E. B., MILLER, R., AND PHILLIPS, R. Nanoindentation and incipient plasticity. *Journal of Materials Research* 14, 6 (1999), 2233.
- [91] TADMOR, E. B., ORTIZ, M., AND PHILLIPS, R. Quasicontinuum analysis of defects in solids. *Philosophical Magazine A* 73 (1996), 1529–1563.
- [92] TADMOR, E. B., SMITH, G. S., BERNSTEIN, N., AND KAXIRAS, E. Mixed finite element and atomistic formulation for complex crystals. *Physical Review B* 59(1) (1999), 235–245.
- [93] TAUPIN, V., CAPOLUNGO, L., FRESSENGEAS, C., DAS, A., AND UPADHYAY, M. Grain boundary modeling using an elasto-plastic theory of dislocation and disclination fields. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 61, 2 (2013), 370–384.
- [94] THOMAS, G. J., SIEGEL, R. W., AND EASTMAN, J. A. Grain boundaries in nanophase palladium: high resolution electron microscopy and image simulation. *Scripta Metallurgica and Materialia* 24 (1990), 201–209.
- [95] VALIEV, R. Z., ISLAMGALIEV, R. K., AND ALEXANDROV, I. V. Bulk nanostructured materials from severe plastic deformation. *Progress in Materials Science* 45 (2000), 103–189.
- [96] VAN SWYGENHOVEN, H. Microstructure and mechanical behavior of nanocrystalline metals. *Science* 296 (2002), 66.
- [97] VAN SWYGENHOVEN, H., AND DERLET, P. M. Grain-boundary sliding in nanocrystalline fcc metals. *Physical Review B* 64 (2001).
- [98] VAN SWYGENHOVEN, H., SPACZÉR, M., CARO, A., AND FARKAS, D. Competing plastic deformation mechanisms in nanophase metals. *Physical Review B* 60 (1999), 22–25.
- [99] WANG, Y. M., , V., H. A., AND MA, E. Defective twin boundaries in nanotwinned metals. *Acta Materialia* 54(10) (2006), 2715–2726.

- [100] WARNER, D., SANSOZ, F., AND MOLINARI, J. Atomistic-based continuum modeling of deformation mechanisms in nanocrystalline copper. *International Journal of Plasticity* 22 (2006), 754.
- [101] WATANABE, T. An approach to grain boundary design for strong and ductile polycrystals. *Res Mechanica* 11 (1984).
- [102] WATANABE, T., AND TSUREKAWA, S. The control of brittleness and development of desirable mechanical properties in polycrystalline systems by grain boundary engineering. *Acta Materialia* 47 (1999), 4171–4185.
- [103] WEI, Y., AND ANAND, L. Grain-boundary separation and sliding: application to nanocrystalline materials. *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 52 (2004), 2587–2616.
- [104] WEI, Y. J., AND SU, C. ANAND, L. A computational study of the mechanical behavior of nanocrystalline fcc metals. *Acta Materialia* 54 (2006), 3177–3190.
- [105] WOLF, D., YAMAKOV, V., PHILLPOT, S., MUKHERJEE, A., AND GLEITER, H. Deformation of nanocrystalline materials by molecular-dynamics simulation: relationship to experiments. *Acta Materialia* 53 (2005), 1–40.
- [106] WROBEL, L. C., , AND ALIABADI, M. H. The boundary element method: Applications in thermo-fluids and acoustics. *John Wiley & Sons Ltd., England, vol. 1* (2002).
- [107] WU, H. A., LIU, G. R., AND WANG, J. S. Atomistic and continuum simulation on extension behaviour of single crystal with nano-holes. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 12 (2004), 225–233.
- [108] YAMAKOV, V., WOLF, D., SALAZAR, M., PHILLPOT, S., AND GLEITER, H. Length-scale effects in the nucleation of extended dislocations in nanocrystalline al by molecular-dynamics simulation. *Acta Materialia* 49(14) (2001), 2713–2722.
- [109] YANG, X., ZHOU, T., AND CHEN, C. Effective elastic modulus and atomic stress concentration of single crystal nano-plate with void. *Computational Materials Science* 40 (2006), 51–56.
- [110] YIP, S. Nanocrystals: the strongest size. *Nature* 391 (1998).
- [111] ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L., AND ZHU, J. Z. *The finite element method: its basis and fundamentals*. Butterworth-Heinemann; sixth edition, 2005.

Appendix A

Annex to chapter 2: Paper 1

Author : V. Péron-Lührens, A. Jérusalem, F. Sansoz, L. Stainier, and L. Noels
Title : A two-scale model predicting the mechanical behavior of nanocrystalline solids
Journal : Journal of the Mechanics and Physics of Solids
Year : 2013
Volume : 61
Pages : 1895 - 1914
DOI : 10.1016/j.jmps.2013.04.009
ISSN : 0022-5096
Permanent link : <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmps.2013.04.009>

Appendix B

Annex to chapter 3: Paper 2

Author : V. Péron-Lühns, F. Sansoz, A. Jérusalem and L. Noels
Title : Two-scale Computational Modeling of Intergranular Fracture in Nanocrystalline Copper Metals
Journal : Computational Materials Science, in press
Year : 2014

Appendix C

Annex to chapter 4: Paper 3

Author : V. Péron-Lühns, F. Sansoz and L. Noels
Title : Quasicontinuum study of the shear behavior of defective tilt grain boundaries in Cu
Journal : Acta Materialia
Year : 2014
Volume : 64
Pages : 419 - 428
DOI : 10.1016/j.actamat.2013.10.056
ISSN : 1359-6454
Permanent link : <http://dx.doi.org/10.1016/j.actamat.2013.10.056>

Appendix D

Annex : Interim report

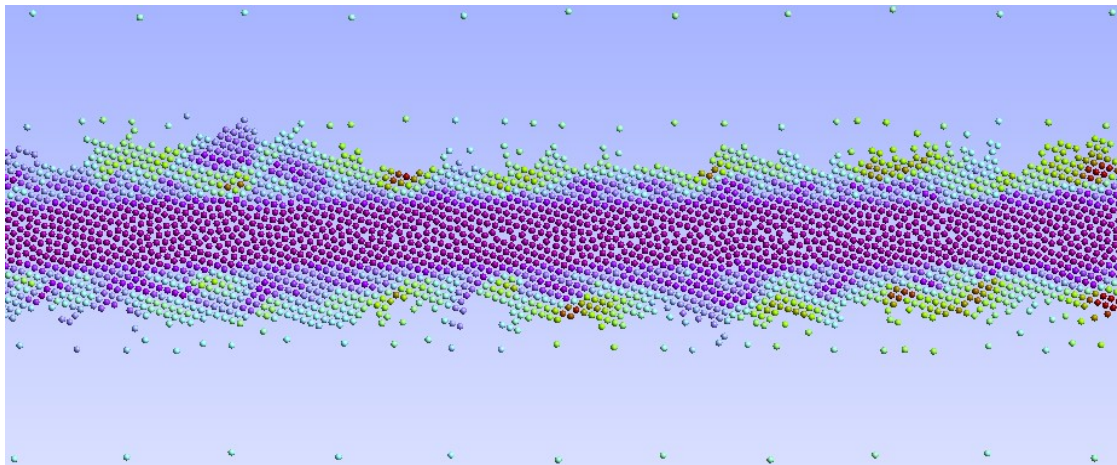


**RAPPORT INTERNE AU DEPARTEMENT AEROSPATIAL &
MECANIQUE**

**CONNEXION DES ECHELLES ATOMIQUE ET CONTINUE EN
MECANIQUE DES POLYCRISTAUX : METHODE QUASI-CONTINUE**

ETUDE PRELIMINAIRE

(Du 01/12/2007 au 07/07/2008)



Vincent Péron-Lührs

Sous la direction scientifique du Professeur Laurent Stainier

SOMMAIRE

Introduction et Objectif.....	3
Introduction.....	3
Objectif.....	4
1. QC.....	5
1.1. La théorie Quasi-Continue.....	5
1.2. Le Code QC.....	5
1.2.1. Structure du code QC.....	6
1.2.1.1. User_bcon.....	8
1.2.2. Description du fichier d'entrée: gb_shear.in.....	9
1.2.3. Résumé du processus QC en cisaillement.....	17
1.2.4. Description des variables du code QC.....	18
1.2.4.1. Les variables du module mod_global.....	18
1.2.5. Post-traitement: Conversion des fichiers .pos en .plt.....	21
1.2.6. Théorie EAM et librairie QC des potentiels.....	21
1.2.6.1. Aperçu de la théorie de la méthode des atomes enrobés (EAM).....	21
1.2.6.2. La librairie QC des potentiels.....	22
1.3. Orientation des grains et indices de coïncidence de site Σ	22
1.4. Essai de cisaillement.....	24
1.4.1. Les commandes pour lancer l'étude du cisaillement.....	24
1.4.2. Les routines utilisateur.....	24
1.4.2.1. User_mesh.....	24
1.4.2.2. User_bcon.....	25
1.4.2.3. User_pdel et courbe charge-déplacement.....	27
1.5. Essai de traction.....	28
1.5.1. Modification du code source.....	28
1.5.2. Fichiers d'entrée pour la traction.....	28
2.1. Etude du cisaillement.....	29
2.1.1. Objectif de l'étude.....	29
2.1.2. Aperçu de la simulation numérique directe (DNS).....	29
2.1.3. Paramètres des simulations.....	30
2.2. Etude de la traction.....	30
2.2.1. Objectif de l'étude.....	30
2.2.2. Constantes élastiques et orientations : méthode utilisée.....	30
2.2.3. Représentation des courbes contraintes-déformation avec différents potentiels.....	32
2.2.4. Paramètres des simulations.....	32
3. Résultats.....	33
3.1. Traction.....	33
3.1.1. Constantes élastiques et orientations.....	33
3.1.2. Constante élastique et potentiels.....	34
3.1.3. Représentations des courbes contraintes-déformation en traction.....	34
3.2. Cisaillement.....	35
3.2.1. Courbes contraintes-déformations.....	35
3.2.1.1. Aluminium et cuivre : comparaison avec le travail de Sansoz et Molinari12.....	35
3.2.1.2. Paladium, Nickel, Argent, Platine, Or.....	36
3.2.2. Discussion.....	38
Conclusions et perspectives.....	39
Bibliographie.....	42

Introduction et Objectif

Introduction

Les récents développements de la microscopie qui autorisent l'exploration des défauts à l'échelle atomique ont rendu possible une connexion plus directe entre les défauts et les réponses macroscopiques qu'ils engendrent. Les techniques de microscopie haute résolution, qui permettent la détermination à l'échelle atomique de la structure des coeurs des dislocations et des joints de grain, et la microscopie de force atomique qui améliore notre compréhension du phénomène d'indentation, mettent en évidence la nécessité de modéliser à cette échelle les comportements mécaniques des matériaux. Toutes ces expériences en microscopie exigent un renforcement de la compréhension de la connexion entre la mécanique des défauts et une description macroscopique des matériaux. Cependant, le lien entre la structure (nano et micro) des défauts et le comportement macroscopique est souvent difficile à cerner, pose des problèmes théoriques importants et reste en conséquence un domaine de recherche très actif.

Un grand nombre de mécanismes fondamentaux sous-jacent au comportement inélastique des matériaux sont fonction des défauts de réseau cristallin et sont en conséquence accessibles par simulation atomistique directe, ou bien par des potentiels empiriques ou à travers des calculs quantiques *ab-initio*. Cependant le rapport entre les calculs atomistiques et le comportement macroscopique des matériaux est très souvent surestimé. De manière générale, les mécanismes à l'échelle atomique sont séparés du comportement macroscopique qu'ils engendrent par un vaste ensemble d'échelles intermédiaires ou mésoscopiques qui moyennent et modulent les phénomènes atomistiques. Les théories continues se reposent sur la supposition que les champs pertinents qui décrivent l'état d'un matériau varient lentement à l'échelle atomique. Ces théories éludent à fortiori le voisinage des défauts cristallins ou toute autre entité ayant une structure à l'échelle atomique. Ces théories continues peuvent cependant être enrichies en y incorporant des informations atomistiques additionnelles qui permettent de palier à cette cassure présente entre échelles atomistique et macroscopique.

C'est ici que la notion de modélisation multi-échelle prend tout son sens en ceci qu'elle intègre l'ensemble des mécanismes atomistiques pour générer une réponse macroscopique. Premièrement, la gamme entière des comportements des matériaux est divisée hiérarchiquement selon les longueurs caractéristiques des différentes échelles. Ensuite, les processus pertinents sont identifiés et chaque processus physique irréductible opérant de façon indépendante est pris en compte à son échelle caractéristique. De cette façon, chaque processus à une échelle représente la moyenne des processus opérant à l'échelle caractéristique inférieure, entraînant un ordre parmi les processus. Les systèmes pour lesquels ces relations sont bien définies permettent de réduire l'effort de modélisation à l'analyse de chaque processus unitaire menant à une description complète du comportement macroscopique d'un matériau.

Présentement, l'analyse des mécanismes unitaires et du comportement effectif d'un matériau sont reliés ou bien par des procédés numériques ou par un assortiment disjoint d'outils analytiques comme la théorie des champs moyens, théorie de transition d'état, homogénéisation. Du fait que l'analyse multi-échelle est un vaste domaine d'étude et qu'elle est en phase de développement, la modélisation qui relie l'échelle atomistique à l'échelle macroscopique ne peut être promptement réduite à une théorie formelle unifiée.

Dans l'optique de dégager les mécanismes pertinents intervenant à l'échelle atomique et par là même de contribuer à la création d'une théorie multi-échelle unifiée, M. Ortiz et R. Phillips¹ ont développé une méthode dite « quasi-continue » (QC) fournissant un procédé judicieux permettant de lier de façon harmonieuse (sans frontières) et adaptative les domaines atomistiques et continus.

Objectif

L'objectif de ce travail est d'utiliser la méthode de M. Ortiz et R. Phillips^{1,2} pour un certain nombre de cas de façon à en dégager des lois de comportement mécanique à l'échelle du milieu continu. Ces paramètres et les lois qui en découlent seront dans un deuxième temps comparés aux théories continues pour en avérer la pertinence sur base qualitative puis quantitative.

La modélisation du comportement mécanique des polycristaux est basée sur l'étude de deux éléments principaux constitutifs de ce type de structure; d'une part le comportement mécanique du matériau massif (grains monocristallins), et d'autre part le comportement mécanique des joints de grain. La méthode QC permet de modéliser les phénomènes apparaissant aux joints de grain et pourrait à terme permettre de dégager un modèle cohésif élastoplastique effectif à l'échelle atomique qui viendrait compléter les modèles ad hoc continus développés par A. Jérusalem, L. Stainier et R. Radovitzky³, à savoir la méthode de simulation numérique directe (DNS) continue des agrégats polycristallins.

De façon à dégager un modèle élastoplastique relatif au comportement des joints de grain, cette étude préliminaire se base dans un premier temps sur la description de cas de cisaillement. Comme nous le verrons dans cette étude, le code QC possède une librairie contenant un certain nombre de potentiels (issus de calculs ab-initio calculés à 0°K, décrits de façon succincte ici) décrivant les forces d'interaction entre les atomes et qu'il convient de tester les uns après les autres de façon à distinguer ceux qui permettent la meilleure description possible du comportement mécanique des métaux polycristallins subissant des contraintes de cisaillement.

La première partie de ce rapport nous introduira à la méthode QC, une description sommaire du code source et exhaustive du fichier d'entrée et des variables du code QC sera fournie. Les techniques de post-traitement feront aussi l'objet d'une description détaillée. Une introduction sur l'orientation des grains les uns par rapport aux autres et la notion d'indice de coïncidence sera exposée. Les potentiels et la théorie EAM feront l'objet d'une présentation succincte. Puis un bref aperçu des applications de QC clôturera cette première partie.

La deuxième partie s'appliquera à décrire dans son intégralité les études préliminaires de cisaillement déjà réalisées ainsi que des études de traction.

La troisième partie de ce rapport présentera les résultats obtenus et s'attachera à comprendre et interpréter les phénomènes observés tout en comparant ces résultats aux modèles ad hoc continus susmentionnés.

Finalement, les conclusions et perspectives donneront un aperçu des différentes voies d'études qu'offre un tel travail préliminaire.

1. QC

1.1. La théorie Quasi-Continue

La théorie quasi-continue de Ortiz et Phillips^{1,2} fournit une méthode de calcul pour lier les domaines atomistiques et continus. L'objectif principal de cette théorie est d'obtenir une description atomistique systématique par, et seulement par, l'introduction judicieuse de contraintes cinématiques. Ces contraintes cinématiques sont sélectionnées et conçues pour maintenir une résolution atomistique là où nécessaire - par exemple dans le voisinage d'un défaut de réseau - et de traiter collectivement un large nombre d'atomes dans les régions où le champ de déformation varie lentement. En conséquence, les paramètres d'entrée de cette théorie concernant le comportement sont atomistiques, et toutes les approximations sont strictement cinématiques par nature.

La théorie commence par un modèle sous-jacent atomistique traditionnel qui déduit l'énergie du cristal à partir des positions atomiques. La configuration spatiale du cristal est ensuite réduite à un sous-ensemble d'atomes représentatifs qui dans la suite deviendront les seuls degrés de liberté du cristal. Les positions des atomes restants (non représentatifs) sont obtenues par interpolation linéaire des coordonnées des atomes représentatifs. Ensuite, les équations d'équilibre sont obtenues par minimisation de l'énergie potentielle du cristal sur l'ensemble de la configuration spatiale réduite. Il existe donc autant d'équations d'équilibre que d'atomes représentatifs.

La sélection des atomes représentatifs est basée sur la variation locale du champ de déformation. Par exemple, le maillage ne sera pas adapté tant que la variation du champ de déplacement de l'ensemble des éléments d'un triangle du maillage (issu de la triangulation de Delaunay) n'excède pas une fraction du vecteur de Burger. Ceci assure une résolution atomistique complète comme par exemple près du coeur d'une dislocation. A l'inverse, loin des défauts et des régions hautement contraintes, la densité des atomes représentatifs diminue rapidement, et le mouvement collectif des atomes est dicté, sans perte significative de précision, par un faible nombre de degré de liberté. Dans ces régions décrites de manière grossière, le comportement du modèle est celui d'un modèle continu.

La méthode QC permet la simulation directe de systèmes exigeant l'application de conditions aux limites contrôlées comme dans les modèles traditionnels de mécanique continue. Elle fournit une résolution atomistique au coeur des défauts sans la limitation de taille propre aux modèles purement atomistiques.

1.2. Le Code QC

Le programme QC, écrit en Fortran 90 par Ortiz et Phillips, est un logiciel libre (www.qcmethod.com) fourni avec un tutoriel (illustrant les principales caractéristiques du code) et un manuel de référence (décrivant de manière complète d'une part la structure du code et d'autre part l'ensemble des routines ou instructions présentes dans le code QC). Trois exemples d'applications regroupant les caractéristiques principales de QC sont également fournis et permettent une prise en main rapide du logiciel.

Le logiciel libre disponible sur le site QC est soumis à certaines limitations qu'il est nécessaire d'énumérer et de décrire:

- Il est limité à des problèmes avec des conditions aux limites à deux dimensions qui peuvent être décrits avec des champs de déplacement de la forme:

$$u_x(x, y), u_y(x, y), u_z(x, y).$$

En dépit de la contrainte à deux dimensions, tous les calculs atomistiques sont exécutés en trois dimensions. Ceci revient à simuler une tranche dont l'épaisseur est égale à la distance cristallographique minimum répétée hors du plan et pour laquelle on applique des conditions aux limites périodiques.

- Le code est limité à des matériaux cristallins avec une structure de réseau simple comme les structures cubiques face centrée (CFC) et cubiques corps centré (CC). On ne peut en conséquence pas simuler des structures complexes comme les structures hexagonales compactes (HC) où des unités asymétriques contenant plusieurs espèces. Notons qu'il est cependant possible de simuler des systèmes avec de multiples structures et espèces si celles-ci sont disposées dans des grains séparés.
- Ce code est un modèle quasi-statique basé sur la minimisation de l'énergie. Il peut être utilisé pour étudier des structures à l'équilibre à température nulle, mais ne permet pas la simulation de processus dynamiques ou des effets donnés à température finie.
- Les interactions atomiques sont limitées à des potentiels empiriques. L'énergie totale du système peut être décomposée comme la somme des énergies des atomes du système. En l'occurrence, les potentiels pris comme source des interactions entre atomes résultent des calculs effectués par méthode dite des «atomes enrobés» (Embedded-Atome Method ou encore EAM).

Ces limitations ne constituent pas les limitations de la méthode QC en elle-même. L'extension à trois dimensions⁴, à des cristaux complexes^{5,6} ou à des problèmes à température finies⁷ ont fait l'objet de différentes études.

1.2.1. Structure du code QC

Le code QC est constitué d'un fichier principal `qcmain.f` et d'un grand nombre de fichiers additionnels commençant par le suffixe « `mod_` » et contenant chacun un module Fortran 90 dédié à une tâche spécifique ou à un ensemble de tâches conjuguées. Chaque module contient les routines et/ou variables associées à sa tâche. Les modules de QC et leurs tâches associées sont les suivants:

- `mod_adaption.f`: Affinement ou adaptation automatique du maillage.
- `mod_bandwidth.f`: Renombrement nodal limitant les paramètres de la matrices de raideur.
- `mod_boundary.f`: Modèle des limites et zones à attribution spéciales.
- `mod_check.f`: Vérifie la pertinence des dérivées numériques.
- `mod_cluster.f`: Construit et manipule les clusters d'atomes.
- `mod_crystal.f`: Génère le réseau structural du cristal.
- `mod_element.f`: Routine éléments finis.

- `mod_file.f`: Ouverture des fichiers et régence des routines.
- `mod_ghost.f`: Calcule les forces fantômes à but correctif.
- `mod_global.f`: Contient les variables globales et leurs initialisations.
- `mod_grain.f`: Définition et calculs de la cristallographie des grains.
- `mod_head.f`: Exécution et organisation des commandes principales.
- `mod_macro.f`: Exécution et organisation des commandes macro.
- `mod_material.f`: Définition du modèle du/des matériau(x).
- `mod_mesh.f`: Génération du maillage par triangulation de Delaunay.
- `mod_standard.f`: Gère les routines Fortran non standardisées.
- `mod_output.f`: Génère l'interface de sortie.
- `mod_pload.f`: Gère le temps du système et les variables de chargement.
- `mod_plotting.f`: Génère les fichiers graphiques au format Tecplot®.
- `mod_poten_eam.f`: Potentiels interatomiques (EAM).
- `mod_qclib.f`: Librairie de routines diverses.
- `mod_repatoms.f`: Définition et calculs associés aux atomes représentatifs.
- `mod_restart.f`: Manipulation de la reprise d'une simulation.
- `mod_savemesh.f`: Module auxiliaire au module d'adaptation utilisé pour le stockage des données du maillage et pour le transfert des données relatives aux champs.
- `mod_solve.f`: Gradient conjugué et méthode de convergence Newton-Raphson.
- `mod_stiff.f`: Stockage et manipulation des matrices de raideur.
- `mod_types.f`: Déclaration des types Fortran.

A moins que l'utilisateur ne souhaite modifier le code QC en lui-même, il n'est pas nécessaire de comprendre la plupart des routines utilisées dans le code. Les routines importantes avec lesquelles l'utilisateur doit se familiariser sont au nombre de 5 et portent des noms du type `user_APP.f` (APP est le nom de l'application). Ces routines sont les suivantes:

- `user_mesh.f`: Cette routine produit le maillage.
- `user_bcon.f`: Cette routine applique les conditions aux limites spécifiques.
- `user_pdel.f`: Cette routine définit la mesure scalaire de la force appliquée pour une condition aux limites donnée.
- `user_potential.f`: Cette routine calcule l'énergie (et les forces et raideurs correspondantes) associée aux potentiels externes. Ces contributions sont ajoutées à l'énergie totale du système et à ses dérivées. C'est une approche alternative à l'application des conditions aux limites.
- `user_plot.f`: Cette routine donne la possibilité à l'utilisateur de créer des graphiques spéciaux pour une application donnée.

1.2.1.1. User_bcon

La routine « `user_bcon` » est appelée par la macro « `bcon` » pour appliquer les conditions aux limites spéciales de la simulation. Avant de discuter du contenu de la routine, il est nécessaire d'expliquer comment les conditions aux limites sont appliquées dans QC. Deux variables de QC sont reliées à l'application des conditions aux limites :

- `time` : (double précision) : Est une mesure scalaire du pas de charge. En dépit de son nom, il s'agit d'une variable sans dimension dont on se sert comme compteur des pas de charge.
- `prop` : (double précision) : Est la valeur correspondant à la variable « `time` » dans la table des charges proportionnelles. Cette table lie la variable « `time` » aux propriétés physiques « `prop` » qui sont utilisées pour appliquer les conditions aux limites. Par exemple, « `prop` » pourrait être de déplacement vertical de l'indenteur dans la simulation d'indentation, le facteur d'intensité de contrainte dans la simulation d'une rupture, ou encore la déformation dans un essai de cisaillement.

QC utilise « `prop` » automatiquement pour appliquer les conditions aux limites à chaque pas de charge. Avant de lancer le processus de minimisation énergétique NR, le programme QC exécute deux segments de code pour assigner les déplacements aux degrés de liberté contraints et les forces externes aux degrés de liberté libres.

! Set displacements of constraints nodes

```
do i = 1, numnp
  do j = 1, ndf
    if (id(i, j) == 1) b(i, j) = prop*f(i, j)
  enddo
enddo
```

·
·
·

! Set external forces applied to free nodes

```
do i = 1, numnp
  do j = 1, ndf
    if(id(i, j) == 0) then
```

```

                dr (i, j) = prop*f(i, j)
            else
                dr (i, j) = 0.0_dp
            endif
        enddo
    enddo

```

La variable $id(i, j)$ indique si le j ème degré de liberté du nœud i est contraint ou libre et $f(i, j)$ est la j ème composante de la force normalisée appliquée au i ème nœud (si $id(i, j) = 0$) ou le déplacement normalisé (si $id(i, j) = 1$).

1.2.2. Description du fichier d'entrée: `gb_shear.in`

Les commandes du code QC sont introduites par le biais d'un fichier d'entrée (conventionnellement, mais pas nécessairement, avec l'extension `.in`). La première action du programme est l'analyse de ce fichier d'entrée. Le fichier d'entrée du premier exemple (cisaillement avec marche dans le plan de glissement) fourni avec le logiciel libre apparaît ici dans son intégralité.

```

1      head Shear Loading of a twin grain boundary with a step
2      2500,5000

3      % initialize flag settings
4      flag,NlocOn,T
5      flag,SurfOn,F
6      flag,GrainOn,T
7      flag,GhostOn,F

8      % initialize factor settings
9      fact,PROXFACT,2.0
10     fact,ADAPFACT,0.0
11     fact,CUTFACT,1.5
12     fact,epsr,0.15

13     % read in material definitions
14     mate,,1,..../Potentials/al_ea

15     % read in the no-adaption zones
16     zone,direct,,1
17     2
18     4
19     -100.d0 -50.d0
20     -100.d0 50.d0
21     -10000.d0 50.d0
22     -10000.d0 -50.d0
23     4
24     100.d0 -50.d0
25     10000.d0 -50.d0
26     10000.d0 50.d0
27     100.d0 50.d0

```

```

28 % read in grain information
29 grains,direct
30 2
31 1
32 -0.823028 2.32787 1.42552727
33 0.0 0.0 0.0
34 -1.0 -1.0 2.0
35 1.0 1.0 1.0
36 0.0
37 20.0
38 8
39 -200.d0 -6.88 F
40 -100.d0 -6.88 T
41 -2.46908 -6.88 T
42 0.0 0.1 T
43 100.d0 0.1 F
44 200.d0 .1 F
45 200.d0 200.d0 F
46 -200.d0 200.d0 F
47 1
48 2.46908 0.0 1.425527271
49 -0.05 0.0 0.0
50 1.0 1.0 -2.0
51 1.0 1.0 1.0
52 0.0
53 20.0
54 8
55 -200.d0 -6.8801 F
56 -200.d0 -200.d0 F
57 200.d0 -200.d0 F
58 200.d0 0.09999 F
59 100.d0 0.09999 T
60 0.0d0 0.09999 T
61 -2.46908 -6.880001 T
62 -100.d0 -6.880001 F

63 % read in constitutive information
64 cons,setf,1,..../Potentials/al_ea

65 % generate a simple coarse mesh
66 mesh,,8,8

67 end

68 macros
69 tole,,1.0d-6
70 proportional,,2,,0.,0.,1000.,1000.

71 % compute local/nonlocal status and automatically
72 % refine nonlocal regions
73 status

74 plot,bcon,gb shear,3,1.,1.
75 plot,disp,gb shear,0,1.,1.
76 plot,repatom,repatom

77 dtime,,0.005
78 loop,load,10
79     bcon
80     loop,,200
81         tang
82         solve,nr,1.0,10000,1

```

```

83             status,update
84             convergence,force
85             next
86             plot,disp,gb shear,0,1.,1.
87             report
88             pdel,,p-delta
89             restart,write,shear
90             time
91     next,load
92     end
93     stop

```

Notons que les nombres le long de la marge à gauche ont été ajoutés au fichier d'entrée pour faciliter le référencement. La suite de cette partie s'attachera à décrire les fonctionnalités et options de chaque commande ligne par ligne.

Lignes 1 à 2.

La première ligne de toute simulation QC prend la forme de la première ligne du fichier `gb_shear.in`. Elle comprend le nom de la simulation qui ne doit pas excéder 80 caractères et doit être écrit sur une seule ligne. Le nom de la simulation sera par la suite recopié dans le fichier de sortie `gb_shear.out`.

La deuxième ligne comprend deux valeurs: 2500 est le nombre maximum de noeuds du maillage et 5000 est le nombre d'éléments maximum (triangulaires). Lorsque l'affinement du maillage requiert un nombre plus élevé de noeuds ou d'éléments, la simulation s'arrête.

Lignes 3 à 7: Réglage des options, les commandes flag.

Les commandes «flag» sont utilisées pour activer (T pour True)/désactiver (F pour False) certaines options (voir manuel de référence pour une description exhaustive de l'ensemble de ces options, leurs effets et leurs valeurs par défaut). Nous nous contenterons de décrire les options présentes dans le fichier d'entrée de cet exemple:

- *Ligne 4:* `NlocOn=T`: Active les atomes représentatifs non locaux. `NlocOn=F` lance une simulation purement locale.
- *Ligne 5:* `SurfOn=F`: Les surfaces libres ne déclencheront pas de non-localité au cours de la simulation, même si elles le devraient pour prendre correctement en compte l'énergie associée aux surfaces. Cette approche peut être utilisée pour réduire l'effort de calcul pour les simulations où les effets de surface ne sont pas importants pour le/les phénomène(s) observé(s). Si `SurfOn=T` alors les atomes représentatifs proches (la distance dépend des variables `PROXFACT` et `rcut`) des surface libres et actives seront rendus non-locaux. Notons que si l'on désire avoir les effets de surface activés, `SurfOn` et `NlocOn` doivent être tous les deux activés.
- *Ligne 6:* `GrainOn=T`: est l'analogie de `SurfOn` pour activer les frontières du/des grain(s). Pour que les frontières des grains déclenchent la non-localité, `GrainOn` et `NlocOn` doivent être activés. C'est le cas dans le présent fichier d'entrée ou l'objectif est d'étudier les détails de la migration d'une marche dans un joint de grain soumis à une contrainte de cisaillement.
- *Ligne 7:* `GhostOn=T`: Active la correction des forces fantômes pour palier aux forces artefact liées aux interfaces local/non local.

Lignes 8 à 12: Réglage des facteurs, les commandes fact.

Les commandes « fact » sont similaires aux commandes flag à l'exception qu'elles sont utilisées pour régler des facteurs à valeurs réelles au lieu de T et F de forme booléenne. Une liste détaillée de ces facteurs est fournie dans le manuel de référence. Les valeurs associées à ces facteurs sont des réels double précision.

- *Ligne 9:* PROXFACT=2.0: PROXFACT est utilisé pour déterminer la distance pour laquelle interviennent les effets non-locaux. Pendant la simulation, un atome représentatif devient non-local si n'importe quelle paire d'éléments à une distance PROXFACT*rcut de l'atome représentatif (avec rcut comme rayon de coupure du potentiel atomistique) ont des tenseurs de déformation significativement différents. Cette différence significative est déterminée en comparant la différence entre les valeurs propres du tenseur fondamental droit de Cauchy-Green C et le facteur epscr défini ci-dessous. Plus précisément, en prenant comme valeurs propres de C dans deux éléments a et b respectivement λ_k^a et λ_k^b (k=1...3), la non-localité est déclenchée lorsque:

$$\max_{a,b;k} |\lambda_k^a - \lambda_k^b| > epscr$$

De cette façon, les atomes représentatifs sont rendus non-locaux s'ils sont à une distance PROXFACT*rcut d'un joint de grain ou d'une surface libre.

- *Ligne 10:* ADAPFACT=0.0: ADAPFACT est utilisé pendant l'affinement du maillage. Les éléments à l'intérieur d'une distance ADAPFACT*rcut de n'importe quel atome représentatif sont sujets à une adaptation lorsque la macro adap est appelée (voir manuel discussion du manuel à ce sujet).
- *Ligne 11:* CUTFACT=1.5: Chaque atome représentatif non-local requiert la liste des atomes dans la configuration déformée se trouvant à l'intérieur du rayon de coupure de l'atome représentatif pour en calculer l'énergie et les forces d'interactions associées. Puisque la recherche des voisins est un processus qui exige un temps de calcul important, il est bien plus pratique de stocker une sphère de voisins légèrement plus grande, à l'intérieur de CUTFACT*rcut, et mettre à jour cette liste de voisins seulement quand des voisins additionnels se sont placés dans cette dernière sphère. CUTFACT=1.5 signifie que le rayon de coupure efficace est 50% plus grand que le rayon de coupure réel.
- *Ligne 12:* epscr=0.15: Le facteur « epscr » est utilisé pour déterminer si un atome représentatif doit être rendu non-local en fonction des variations significatives du gradient de déformation autour de lui.

Lignes 13 à 14: Les commandes matériaux.

Les commandes matériaux sont utilisées pour définir les matériaux de la simulation. Cette version du code est limitée à des réseaux de Bravais simples, c'est à dire ceux ayant un seul atome sur chaque site du réseau de Bravais. Les vecteurs de Bravais ont la dimension d'une longueur (dont l'unité est typiquement l'Angström) et sont traités dans un système de coordonnées Cartésiennes x-y-z. La nature de l'atome est identifiée par son nombre atomique.

Lignes 15 à 27: Zones pour lesquelles l'adaptation du maillage ne sera pas autorisée.

Dans certaines simulations il peut être nécessaire de restreindre l'algorithme d'adaptation automatique du maillage de sorte que certaines régions ne soient pas affinées. Il est possible de définir en ce sens des zones à attributions spéciales.

- *Ligne 17*: nzones: Nombre de zones à attributions spéciales.
- *Ligne 18*: nvertices: Nombre de sommets nécessaires à la définition de la première zone spéciale.
- *Lignes 19 à 22*: vertices: Sont les coordonnées x et y de chaque sommets définissant le polygone de la première zone, listées dans le sens inverse des aiguilles d'une montre. Dans cet exemple, chaque zone est définie par un rectangle.
- *Lignes 23 à 27*: idem pour la deuxième zone.

Lignes 28 à 62: Définition du/des grain(s).

Le grain de la méthode QC est défini par le matériau qui le compose, d'une rotation qui oriente le matériau relativement aux axes x-y-z de référence, et des coordonnées x-y du polygone. En pratique, il est préférable de définir les polygones des grains loin de l'espace où les phénomènes attendus sont observés.

L'orientation du/des grain(s) est définie en deux étapes: Tout d'abord le grain est fabriqué selon les coordonnées « naturelles » du matériau, c'est à dire basées sur la définition des vecteurs du réseau de Bravais. Par exemple, dans un matériau CFC, il sera plus pratique de choisir les directions (1-10) et (111) comme directions naturelles x et y du grain. Ensuite si la simulation qui retient notre attention implique deux grains inclinés, une rotation (en degré) suivant l'axe z est introduite.

- *Ligne 30*: ngrains: Spécifie le nombre de grains qui seront définis pour la simulation. Dans l'exemple du cisaillement, il y aura deux grains. Les lignes 31 à 46 définissent le premier grain tandis que les lignes 47 à 62 définissent le deuxième grain.
- *Ligne 31*: material: Spécifie le nombre du matériau qui occupera le premier grain (celui du haut).
- *Ligne 32*: reference atom: Sont les coordonnées (x, y, z) d'un atome du grain 1 choisi comme atome de référence qui sera utilisé comme origine du réseau de Bravais du grain. Les coordonnées de l'atome doivent évidemment se trouver dans le domaine de définition du polygone du grain.
- *Ligne 33*: shift vector: Le « shift vector » ou vecteur de décalage peut être parfois utile pour définir un grain de façon à ce que la limite de la structure du grain corresponde aux souhaits de l'utilisateur. Le code QC établit les frontières du grain en construisant chaque grain individuellement. Dans les régions près des frontières, où la structure du joint de grain à l'échelle atomique est importante, le code QC inclue simplement tous les atomes qui sont sur le réseau de Bravais définissant le grain et pour lesquels la position de référence (non déformée) est à l'intérieur du polygone définissant le grain. Dans certains cas, ceci peut créer une structure de frontière avec des atomes qui sont non physiquement proches. Ceci arrivera par exemple lorsque deux atomes avoisinants deux grains, tous deux géométriquement définis à l'intérieur de leurs grains respectifs, sont inclus dans le modèle en dépit de la trop

courte distance (de l'ordre d'une fraction d'Angström) qui les sépare. Le vecteur décalage est un outil mis à la disposition de l'utilisateur pour éviter ce genre de situation et construire la structure de joint de grain désirée.

- *Ligne 34*: Direction « naturelle » selon x. Est l'orientation du cristal suivant x.
- *Ligne 35*: Direction « naturelle » selon y. Est l'orientation du cristal suivant y.
- *Ligne 36*: Rotation: Est l'angle de rotation en degrés (positif dans le sens inverse des aiguilles d'une montre) selon l'axe z. Cette rotation est appliquée sur le matériau pris dans son orientation naturelle définie plus haut. Dans cet exemple la rotation est nulle: Rotation= 0.d0.
- *Ligne 37*: crystal radius (rayon du cristal): Le calcul de l'énergie locale se fait en calculant l'énergie d'un atome représentatif compris au centre d'un petit cristallite se déformant selon le gradient de déformation. Ce cristallite peut être construit à l'avance, stocké puis reconstruit à chaque boucle de calcul. Le rayon du cristal spécifie en ce sens la taille du cristallite représentatif qui doit être stockée. Dans cet exemple, le rayon du cristal est pris trois fois supérieur au rayon de coupure du potentiel atomistique, ce qui semble un choix raisonnable pour les auteurs.
- *Ligne 38*: Nombre de sommets du polygone: La donnée finale requise pour définir le grain est le polygone définissant la région de l'espace occupée par le grain. Cette ligne définit en conséquence le nombre de sommets définissant cet espace.
- *Ligne 39-46*: Coordonnées des sommets: Chacune de ces lignes correspond aux coordonnées x et y d'un sommet. L'indicatif T ou F en bout de ligne indique si le sommet considéré est actif (T) ou inactif (F) pendant la simulation. Si le sommet est actif, il déclenchera la non-localité dans son voisinage jusqu'à une distance égale à PROXFACT*rcut. Les coordonnées des sommets sont listées dans le sens inverse des aiguilles d'une montre.
- *Lignes 47-62*: Idem pour le second grain.

Ligne 63 à 64: Informations constitutives.

Ce segment d'informations du fichier d'entrée contient les données relatives à la lecture des fichiers contenant les potentiels de la théorie des atomes « enrobés ». En principe, le module (mod_poten_eam.f) peut être remplacé par n'importe quelle autre forme d'interactions atomistiques pour lesquelles l'énergie totale peut être écrite comme la somme de toutes les énergies individuelles des atomes (e.g. Interaction à trois corps). Le module « cons » utilise les potentiels EAM du code de dynamique moléculaire DYNAMO. Ce module se sert d'une grille discrète de points pour définir les fonctions par interpolation de Lagrange.

Le module « cons » est un module qui lit une forme générale des potentiels EAM à partir de fichiers de formats setfl ou funcfl. Ces formats sont ceux compatibles avec le code DYNAMO. Les potentiels provenant d'autres sources peuvent être convertis au format setfl en utilisant le programme utilitaire « dynpots.f » fourni avec le code QC. Le fichier « dynpots.f » se trouve dans la sous-direction « Potentials/FortranSource ». La méthode QC prend en charge les fichiers de potentiels uniquement si ceux-ci possèdent l'extension « .fcn ».

Les fichiers « Funcfl » contiennent seulement les informations des potentiels pour un seul type d'atome, alors que toutes les interactions potentiels de paires noyau-noyau entre noyaux différents sont modélisées selon des considérations géométriques des interactions de paires

homonucléaires. Les fichiers « setfl » contiennent toutes les informations sur les potentiels pour l'ensemble de l'alliage, incluant les interactions de paires entre noyaux différents. Ils peuvent également être utilisés pour définir les potentiels d'une seule espèce atomique.

Concrètement, la clé « setf » indique que le code QC se sert d'un seul fichier contenant toutes les informations sur les potentiels d'interaction. Alors que la clé « func » implique que le code QC se sert d'un ensemble de fichiers séparés pour obtenir l'ensemble des informations relatives aux potentiels d'interaction. En conséquence, il conviendra d'utiliser l'une ou l'autre de ces deux clés de sorte que le code QC puisse d'une part rassembler les fichiers, et d'autre part intégrer correctement les potentiels contenus dans sa librairie.

Lignes 65 à 66: Définition du maillage.

La commande « mesh » appelle la subroutine « user_mesh » définie par l'utilisateur pour générer le maillage de la simulation. Cette routine contient tout d'abord les coordonnées de référence des atomes représentatifs. Elle contient ensuite les détails de la triangulation du maillage (triangulation de Delaunay) qui rend le chevauchement des éléments triangulaires impossibles. Finalement, cette routine peut également être utilisée pour identifier les noeuds sur lesquels les forces ou les déplacements sont imposés. Les deux nombres 8 et 8 indiquent que la boîte de calcul sera représentée par $8*8=64$ atomes représentatifs au départ de la simulation.

Ligne 67: End

La commande « end » dit au code QC que la première partie est terminée.

Ligne 68 à 92: Macros.

La partie macro est initialisée par la commande « macros » à la ligne 68 et se termine par « end » à la ligne 92. La partie macro permet à l'utilisateur de contrôler les conditions de la simulation telles que les conditions aux limites appliquées, programme de chargement, l'introduction de la tolérance de la convergence, produire les graphiques désirés...

- *Ligne 69:* Réglage de la tolérance de convergence: la commande « tole » est utilisée pour régler la tolérance de la convergence de la simulation. Les données introduites sont des réels double précision.
- *Ligne 70:* Définition du programme proportionnel de chargement: En dépit de la nature statique du code QC, la nature de la variable relative à l'incrément du chargement se réfère à celle d'un pseudo-temps (variable « time »). La variable « time » est utilisée pour calculer la variable « prop » du chargement proportionnel. La commande « proportional » est utilisée pour définir la dépendance de la variable « prop » par rapport à la variable « time » par le biais du « proportional factor ». Dans cet exemple la fonction est linéaire et le chargement est défini pour la partie supérieure du grain du haut et pour la partie inférieure du grain du bas. L'incrément de chargement est en conséquence défini par les couples de valeurs (0,0) et (1000,1000). Le code QC trouvera ensuite les valeurs intermédiaires par interpolation linéaire.
- *Lignes 71 à 73:* Calculs du statut des atomes représentatifs:

La commande « status » génère un nombre relatif aux étapes de prétraitement produisant une structure de données utilisée lors de la simulation. Comme son nom l'indique, sa fonction principale est de déterminer le statut local ou non-local de chaque atome.

- *Lignes 74 à 76*: Génération des fichiers graphiques.

La commande « plot » génère divers fichiers de sortie pouvant être lus directement par Tecplot®. Ne disposant pas de ce logiciel, un paragraphe de cette étude sera consacré au post-traitement de ces fichiers de sortie. Il existe un nombre de clefs (key) ou options qui autorise la production d'un nombre variée de graphiques. Par exemple à la ligne 74, la clé « bcon » produit un graphique des atomes représentatifs et son maillage.

- *Ligne 77*: Changement du pas de temps: « dtime ».

La commande « dtime » assigne une valeur numérique à la variable « dt » du code QC qui est la valeur du pas de temps. Pour les appels ultérieurs de la variable de temps « time », « dt » sera utilisé de la manière suivante: $time = time + dt$

Lignes 78 à 91: Pas dans les boucles de chargement.

- *Ligne 78*: la commande « loop »:

La commande « loop » prend la forme suivante: « loop, label, nloop ». Où « label » est un identifiant optionnel qui améliore la lisibilité des fichiers de sortie. « nloop » est le nombre de fois que la boucle sera exécutée. La commande « nloop » doit être suivie (ligne 91) par la commande « next ».

- *Ligne 79*: Application des conditions aux limites: « bcon »:

La commande « bcon » appelle la sous-routine « user_bcon » qui a pour rôle d'appliquer les conditions aux limites en fonction de la valeur attribuée à la variable de chargement proportionnel « prop ».

- *Lignes 80 à 85*: Boucle de la méthode de convergence Newton-Raphson (NR).

La commande « loop » spécifie le nombre maximum d'itérations NR. Le nombre d'itérations est de 200 dans cet exemple, ce qui est un nombre assez large. En effet, dans les cas comme la nucléation d'une dislocation et sa propagation sur une grande distance, la convergence peut dépasser les 100 itérations NR avant d'atteindre une solution convenable.

A chaque pas, le solveur met à jour la tangente de la matrice de raideur en utilisant la commande « tang ». Cette matrice est la dérivée seconde de la fonctionnelle de l'énergie en fonction du déplacement des atomes représentatifs.

- *Lignes 86 à 88*: Sortie:

Arrivé à la ligne 86 la solution a convergé pour le pas de temps considéré (à moins que le nombre maximum d'itérations NR n'ait pas été suffisant). En conséquence, les lignes 86 à 88 produisent trois genres de fichiers de sortie pour chaque pas de temps: un fichier graphique du maillage déformé (plot), un rapport sur l'état énergétique du système (report) et une entrée dans le fichier chargement-déplacement (pdel).

- *Ligne 89*: Ecriture du fichier de redémarrage « restart »:

La commande « restart » avec la clef « write » dans la boucle « loop » génère un fichier qui permet de redémarrer une simulation interrompue. Dans le cas de l'exemple, ce fichier est appelé « shear.res ». Si le fichier « shear.res » existe déjà, il sera renommé par « shear_LAST.res » avant que le nouveau « shear.res » ne soit écrit. Le fichier « restart » généré par cette commande produit un fichier binaire qui contient toutes les données essentielles pour restaurer une simulation QC à partir du moment où ce fichier a été écrit. La simulation sera redémarrée en utilisant la clé « read ». La commande s'écrit à l'extérieur de la boucle « loop » et est la suivante : « restart, read, shear ».

- *Ligne 90*: Incrémentation de la variable de temps « time »:

La dernière commande de cette boucle consiste à incrémenter la variable « time » du temps, ce qui se fait en écrivant simplement « time ».

Ligne 92: Fin « end »:

La commande « end » marque la fin de l'étape « macros » de la simulation.

Ligne 93: Stop

La commande « stop » ferme tous les fichiers ouverts et clôt la simulation.

1.2.3. Résumé du processus QC en cisaillement

Le processus QC peut se résumer en 8 étapes essentielles:

1. Incrémentation de la charge. Les forces sont appliquées sur la partie supérieure du grain supérieur (vers les $x > 0$) et sur la partie inférieure du grain inférieur (vers les $x < 0$).
2. Calcul du statut local/non-local des atomes représentatifs. Un critère de localité est évalué et le statut de chaque atome représentatif est déterminé. A cette étape sont également calculés des pré-processus importants comme le stockage des listes d'atomes et le calcul des fonctions de forme.
3. Evaluation des forces fantômes (si activées).
4. Minimisation de l'énergie. Un solveur est utilisé itérativement pour minimiser l'énergie potentielle totale et identifier la configuration d'équilibre du système sujet au nouveau pas de charge imposée.
5. Adaptation automatique. Tous les éléments du maillage satisfaisant au critère d'adaptation sont « adaptés », c'est à dire, divisés en plus petits éléments avec pour conséquence la création de nouveaux atomes représentatifs. Au même moment, les éléments peuvent également faire l'objet d'un nettoyage, i.e, de la suppression des atomes non nécessaires.
6. Si des éléments ont été ajoutés ou supprimés, le système n'est plus en équilibre et on retourne à l'étape 2 pour recalculer la nouvelle configuration relaxée.
7. Création ou incrémentation des fichiers de sortie: données charge/déplacement, énergie, structure atomique...
8. Retour à l'étape 1 pour un nouvel incrément de la charge.

1.2.4. Description des variables du code QC

Les variables du code QC sont définies d'une manière générale dans le module `mod_global`. D'autres variables trouvent leurs définitions et leurs valeurs par défaut dans le cadre d'une routine et ne sont pas stockées dans le module `mod_global`. En conséquence, la description des variables se fait en deux étapes : Les variables générales de `mod_global` puis les variables particulières des différentes routines.

1.2.4.1. Les variables du module `mod_global`

Le module `mod_global` contient les variables globales du code QC. Les plus importantes des variables présentes dans ce module sont les suivantes :

- **dp** (entier) : Valeur standard du type double précision. (facilite la portabilité du logiciel QC, voir manuel de référence p. 5)
- **hmin** (réel, 0.0 par défaut) : Taille minimale autorisée du côté d'un élément. Prise en charge par la routine « adaption » si différente de 0.
- **iregion (1 : numnp)** (entier, 1 par défaut) : Région du maillage à laquelle est assigné chaque nœud.
- **maxel** (entier) : Nombre maximum d'éléments dans le maillage.
- **maxnp** (entier) : Nombre maximum de nœuds dans le maillage.
- **ndf** (entier, 3 par défaut) : Nombre de degré de liberté par nœud.
- **ndm** (entier, 2 par défaut) : Nombre de dimensions spatiales.
- **nen** (entier, 3 par défaut) : Nombre de nœuds par élément.
- **nregion** (entier, 1 par défaut) : Nombre de région non connectées et maillées séparément.
- **numel** (entier) : Nombre courant d'éléments dans le maillage.
- **numnp** (entier) : Nombre courant de nœuds dans le maillage.
- **nxdm** (entier, 3 par défaut) : Nombre de dimensions des coordonnées nodales.
- **neq** (entier) : Nombre d'équations ($ndf * numnp$).
- **nq** (entier, 14 par défaut) : Dimension de l'ensemble des variables internes d'un élément.
- **nstr** (entier, 6 par défaut) : Dimension de l'ensemble des contraintes « str » et des déformations « eps ».
- **SymmetricMesh** (Booléen, `.False.` par défaut) : Option indiquant si la routine maillante

« delaunay » crée un maillage symétrique.

- **SymmetryDof** (entier) : Donne le plan de symétrie si SymmetricMesh est activée (1 : symétrie relative à $x = \text{SymmetryValue}$, 2 : symétrie relative à $y = \text{SymmetryValue}$).
- **SymmetryValue** (réel) : Valeur de la symétrie pour un maillage symétrique (voir ci-dessus).

Pour plus de détails sur ces variables, voir le fichier `mod_global.f`.

1.2.4.2. Les variables QC

En plus des variables stockées et définies dans le module `mod_global`, le code QC comprend nombre de variables dans différentes routines. Une liste des variables les plus importantes est donnée ci-dessous.

- **b (ndf, numnp)** : (double précision) Ensemble des déplacements nodaux. **b (i, j)** stocke la $i^{\text{ème}}$ composante de déplacement du $j^{\text{ème}}$ nœud. Cette variable peut être modifiée dans la routine « user_bcon ». La valeur initiale de cette variable est zéro au départ de la simulation.
- **db (ndf, numnp)** : (double précision) Incrément au déplacement nodal. **db (i, j)** stocke le changement le plus récent de la $i^{\text{ème}}$ composante de déplacement du $j^{\text{ème}}$ nœud. Il s'agit typiquement du changement dû à un pas itératif du solveur de Newton-Raphson (NR).
- **dr (ndf, numnp)** : (double précision) Vecteur force hors-équilibre. **dr (i, j)** stocke la $i^{\text{ème}}$ composante de la force courante hors-équilibre du $j^{\text{ème}}$ nœud. Dans la configuration d'équilibre, ce vecteur sera très proche de zéro. La norme de ce vecteur est souvent utilisée comme critère de convergence durant l'étape de résolution NR. **dr** est initialisé à zéro au départ de la simulation.
- **eps (nstr, numel)** : (double précision) Ensemble des déplacements élémentaires. **eps (i, j)** stocke la $i^{\text{ème}}$ composante du Lagrangien de déformation finie du $j^{\text{ème}}$ nœud. Ces composantes sont stockées dans l'ordre suivant : E_{xx} , E_{yy} , E_{zz} , E_{xy} , E_{xz} , E_{yz} . **eps** est une variable de sortie et est calculée à partir de chaque valeur du déplacement courant à chaque fois que l'énergie ou les forces hors-équilibre sont calculées.
- **f (ndf, numnp)** : (double précision) Ensemble des conditions aux limites. **f (i, j)** stocke la $i^{\text{ème}}$ composante de la force normalisée appliquée au $j^{\text{ème}}$ nœud (si **id (i, j) = 0**) ou le déplacement normalisé (si **id (i, j) = 1**) qui sont utilisés pour l'application des conditions aux limites. Pour les degrés de liberté non contraints pour lesquels aucune force n'est appliquée, la valeur de **f (i, j)** doit être réglée à zéro (qui est sa valeur initiale par défaut).
- **id (ndf, numnp)** : (entier) L'ensemble des options de contraintes aux limites **id (i, j)** stocke l'option qui identifie si un nœud j doit avoir une composante de déplacement fixe (**id (i, j) = 1**) ou non (**id (i, j) = 0**). Cet ensemble doit être réglé par l'utilisateur, ou bien lors de la génération du maillage par le biais de la routine « user_mesh » ou durant l'application des conditions aux limites dans la routine « user_bcon ». Notons également que la routine d'adaptation du maillage assigne des valeurs « **id** » aux nouveaux nœuds en fonction des valeurs « **id** » des nœuds préexistants. Plus précisément, un nœud $j3$ est ajouté en bissectant une ligne entre deux nœuds existants $j1$ et $j2$. Le $i^{\text{ème}}$ degré de liberté du nouveau nœud sera assigné **id (i, j3) = 1** (si et seulement si) **id (i, j1) = 1** et **id (i, j2) = 1**.

- **itx (3, numel)** : (entier) Matrice d'adjacence. **itx (i, j)** stocke le nombre d'éléments adjacents au $j^{\text{ème}}$ côté de l'élément i . Cet ensemble est créé lors de la génération du maillage dans la routine « user_mesh ».
- **ix (nen, numel)** : (entier) Ensemble des connectivités. **ix (i, j)** stocke le nombre de nœuds global du $j^{\text{ème}}$ nœud définissant l'élément i . Cet ensemble est créé par la routine « user_mesh ».
- **shp (nshp, numel)** : (double précision) Fonctions de forme. La méthode QC utilise des éléments linéaires à trois nœuds, en conséquence il n'existe qu'un point de Gauss au barycentre de chaque élément. Une formulation isoparamétrique est utilisée¹¹. Pour chaque élément i , ce qui suit est stocké dans **shp**.

- **shp (1, i)** : Dérivée $\partial N_1 / \partial x$.
- **shp (2, i)** : Dérivée $\partial N_1 / \partial y$.
- **shp (3, i)** : Valeur de N_1 au point de Gauss (0.333_dp).
- **shp (4, i)** : Dérivée $\partial N_2 / \partial x$.
- **shp (5, i)** : Dérivée $\partial N_2 / \partial y$.
- **shp (6, i)** : Valeur de N_2 au point de Gauss (0.333_dp).
- **shp (7, i)** : Dérivée $\partial N_3 / \partial x$.
- **shp (8, i)** : Dérivée $\partial N_3 / \partial y$.
- **shp (9, i)** : Valeur de N_3 au point de Gauss (0.333_dp).

Ici $N_i(x, y)$ est la fonction de forme associée au nœud i .

- **str (nstr, numel)** : (double précision) Ensemble des contraintes élémentaires. **str (i, j)** stocke la $i^{\text{ème}}$ composante de la contrainte de Kirchhoff du $j^{\text{ème}}$ élément. Ces données sont stockées dans l'ordre suivant : τ_{xx} , τ_{yy} , τ_{zz} , τ_{xy} , τ_{xz} , τ_{yz} . **str** est une variable de sortie qui est mise à jour chaque fois que l'énergie ou les forces hors-équilibre sont calculées pour un déplacement nodal donné. Les contraintes élémentaires sont calculées seulement dans les éléments en contact avec un nœud local.
- **q (nq, numel)** : (double précision) Ensemble des variables internes élémentaires. **q** stocke de nombreuses quantités élémentaires. Pour l'élément **ie1** nous aurons :
 - **q (1, ie1)** : Densité d'énergie de déformation.
 - **q (2 :10, ie1)** : Composantes du gradient de déformation dans l'ordre suivant : F_{11} , F_{21} , F_{31} , F_{12} , F_{22} , F_{32} , F_{13} , F_{23} , F_{33} .
 - **q (11 :13, ie1)** : Valeurs propres du tenseur de déformation de Cauchy-Green droit, $C = F^T F$.
 - **q (14, ie1)** : Numéro du grain contenant le barycentre de l'élément.
- **x (nxdm, numnp)** : (double précision) Ensemble des coordonnées de référence. **x(1...**

nxdm, i) stocke les coordonnées de référence du $i^{\text{ème}}$ atome représentatif (nœud). Notons que même si cette version du code QC est limitée à deux dimensions, l'ensemble **x** comprend trois composantes de façon à décrire correctement la structure cristalline. L'ensemble **x** est généré par la routine « user_mesh ».

- **xsj (numel)** : (double précision) Domaines élémentaires. **xsj (i)** stocke le domaine de l'élément *i* (dans la configuration non déformée).

1.2.5. Post-traitement: Conversion des fichiers .pos en .plt

Comme nous l'avons vu au chapitre 1.2.2, le code QC génère des fichiers graphiques au format teplot® (.plt) qu'il convient de convertir si l'on ne dispose pas de ce dernier logiciel. Un exemple de programme de conversion (écrit en Fortran 90) des fichiers .plt en .pos est fourni en annexe 1. Les fichiers graphiques seront ensuite pris en charge par le logiciel libre « gms ».

1.2.6. Théorie EAM et librairie QC des potentiels

Les interactions atomiques relatives aux simulations QC sont décrites uniquement par des potentiels empiriques se basant sur la méthode des atomes enrobés. Ce paragraphe s'attache à décrire de façon succincte les fondements de cette méthode. Puis, les potentiels et les éléments qu'ils décrivent sont énumérés.

1.2.6.1. Aperçu de la théorie de la méthode des atomes enrobés (EAM)

Au regard de la théorie de la fonctionnelle de densité, l'énergie électronique totale d'un arrangement arbitraire d'atomes peut s'écrire comme une fonctionnelle unique de la densité électronique totale. Le point de départ de la théorie EAM est l'observation que la densité électronique totale dans un métal peut être raisonnablement approximée par la superposition linéaire des contributions individuelles de chaque atome. La densité électronique dans le voisinage de chaque atome peut être exprimée comme la somme de la densité électronique de l'atome en question et de la densité électronique provenant de l'ensemble des atomes environnants. Cette dernière contribution à la densité électronique est une fonction de la position et varie lentement. En faisant l'hypothèse simplificatrice que la densité électronique de fond est constante, l'énergie d'un atome est alors l'énergie associée à la densité électronique de cet atome plus la densité électronique constante de fond. Ceci définit l'énergie d'enrobage qui est fonction de la densité électronique de fond et de la nature de l'atome considéré. De plus, il existe une contribution à l'énergie électrostatique due à l'interaction des noyaux entre eux. Ces idées ont été développées par Daw et Baskes⁸ qui ont montré que ces idées menaient à une approximation de l'énergie totale de la forme:

$$E_{tot} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j(\neq i)} \phi_{ij}(R_{ij}).$$

Dans cette expression, $\rho_{h,i}$ est la densité électronique hôte au niveau de l'atome *i* due à l'ensemble des atomes restants (autres que *i*) du système. $F_i(\rho)$ est l'énergie d'enrobage de l'atome *i* baignant dans la densité électronique de fond ρ . Et $\phi_{ij}(R_{ij})$ se rapporte à

l'interaction de paire répulsive noyau-noyau entre l'atome i et j séparés par une distance R_{ij} .

Notons que F_i dépend seulement de l'atome i considéré alors que ϕ_{ij} dépend des éléments i et j . La densité électronique, approximée par la superposition des densités des atomes, est la suivante :

$$\rho_{h,i} = \sum_{j(\neq i)} \rho_j^a(R_{ij})$$

Où $\rho_j^a(R)$ est la contribution de l'atome j à la densité électronique. Notons que la fonction d'enrobage $F_i(\rho)$ est universelle, en ce sens qu'elle ne dépend pas de la source de la densité électronique de fond. En conséquence, la fonction d'enrobage utilisée pour calculer l'énergie d'un atome dans un alliage est la même que celle utilisée dans un matériau pur. Cette universalité fait de la méthode EAM une technique très pratique pour le traitement des alliages.

1.2.6.2. La librairie QC des potentiels

La librairie QC contient 5 genres de potentiels issus de la théorie des atomes enrobés. Les fonctions d'enrobage de ces potentiels ont été calculées (ou fittées) par des procédés empiriques différents. Les potentiels présents dans la librairie sont les suivants :

1. Potentiels Ercolessi-Adams⁹ noté « EA » : élément : Al.
2. Potentiels Voter-Chen notés « VC » : éléments : Cu, Al, Ag, Au, Pt, Pa, Ni.
3. Potentiels Voter-Chen notés « VC-1 » : élément : Cu.
4. Potentiels Foiles-Daw-Baskes¹⁰ notés « FBD3 » : éléments : Cu, Ag, Au, Pt, Pa, Ni.
5. Potentiels Foiles-Daw-Baskes¹⁰ notés « FBD6 » : éléments : Cu, Ag, Au, Pt, Pa, Ni.

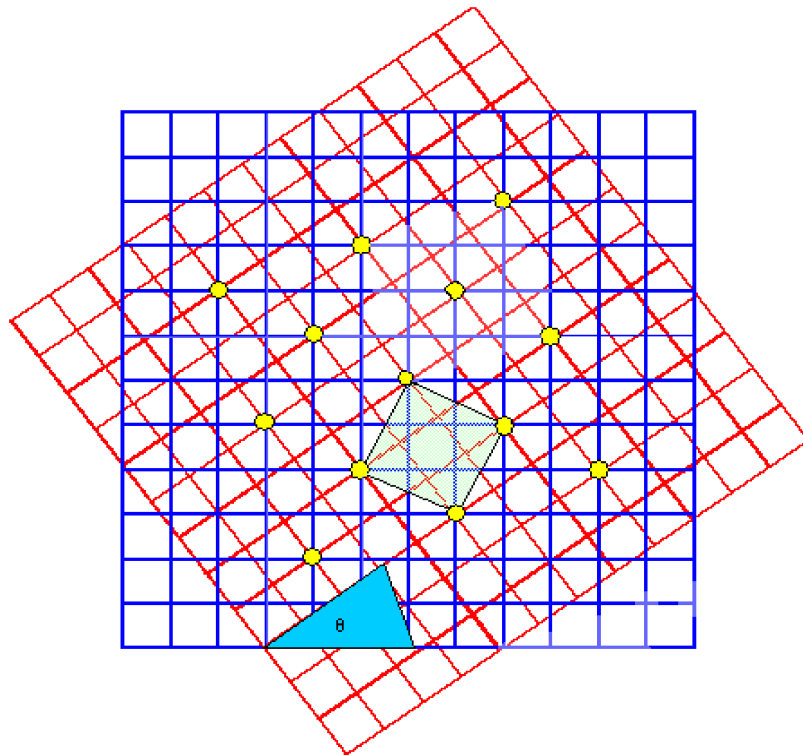
Les potentiels VC et VC-1 fittés par Voter et Chen, et les potentiels FBD3 et FBD6 fittés par Foiles, Daw et Baskes ont été obtenus en utilisant des paramètres de fittage différents.

1.3. Orientation des grains et indices de coïncidence de site Σ

Pour dégager des lois de comportement aux joints de grain, une étude systématique de l'orientation des grains l'un par rapport à l'autre en cisaillement est nécessaire. Comme nous l'avons vu au chapitre 1.2.2. relatif à la description du fichier d'entrée du code QC, l'orientation des grains peut être paramétrée de façon très précise. Bien que cette étude ne contienne pas de résultats exhaustifs concernant l'orientation des grains, une brève introduction à la nomenclature des interfaces et la notion de réseau de site de coïncidence (CSL pour Coincidence Site Lattice) fera office de mémoire pour les développements ultérieurs de cette étude.

$$\Sigma = \frac{V_c}{V_p} = \frac{1}{\rho}$$

Avec V_c représentant le volume de la maille de coïncidence, V_p le volume de la maille primitive du cristal. ρ est l'inverse de la densité de noeuds (ou sites) communs aux deux réseaux cristallins dans le réseau CSL. La figure ci-dessous illustre la théorie CSL. Le réseau bleu est soumis à une rotation d'un angle θ (représenté en bleu) mettant en évidence le réseau de coïncidence (points jaunes). La maille (en 2D) du réseau de coïncidence apparaît en vert.



Dans les matériaux cubiques (i.e. à symétrie cubique), les indices de coïncidence (décrivant la structure intergranulaire) sont tous impairs. Ces indices (Σ) sont reliés à l'angle (θ) et l'axe de rotation $\langle u, v, w \rangle$ entre les cristaux par les relations suivantes :

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{m\lambda}{n}$$

$$\Sigma = (n^2 + m^2 \lambda^2) \alpha$$

$$\lambda = \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$$

$$\alpha = 1 \quad \text{ou} \quad \frac{1}{2}.$$

Avec m et n deux nombres entiers premiers. De plus l'indice de coïncidence est lié aux indices (h, k, l) de Miller du plan du joint par la relation suivante :

$$\Sigma = n(h^2 + k^2 + l^2) \quad \text{avec} \quad n = 1 \quad \text{ou} \quad \frac{1}{2}.$$

L'indice de coïncidence varie d'une manière discontinue avec l'angle de rotation entre les cristaux autour d'un axe donné. Le tableau 1 présente un exemple de ces variations pour des joints de grain de matériaux cubiques d'axe de désorientation $\langle 110 \rangle$ qui servent souvent de modèles de structures intergranulaires.

Tableau 1 : Indice Σ de coïncidence et axe de désorientation $\langle 110 \rangle$ pour des rotations $\leq 70,53^\circ$.

$\Theta^\circ \langle 110 \rangle$	Σ
0	1
26,53	19
31,59	27
38,94	9
50,48	11
58,99	33
70,53	3

NB : Nomenclature utile à la compréhension de l'article de F. Sansoz et J. F. Molinari¹⁰.

1.4. Essai de cisaillement

1.4.1. Les commandes pour lancer l'étude du cisaillement

- Compilation: QCCOMPILER=gnu
- Execution: ../gb <gb_shear.in> gb_shear.out &

1.4.2. Les routines utilisateur

Il existe 3 routines qu'il est essentiel de maîtriser pour appliquer correctement les conditions aux limites, produire un maillage, incrémenter la charge et produire les graphiques désirés. Ces routines sont contenues dans le fichier user_gb.f dans le répertoire QC/GB-example.

1.4.2.1. User_mesh

Cette routine permet d'une part de générer le maillage, et d'autre part de créer les limites rigides de la boîte de calcul. Les nœuds constituant les limites rigides se verront assigner un (**id=1**) et les nœuds libres un (**id=0**). Les conditions aux limites sont alors codées de la manière suivante :

! Boundary conditions

```
do i = 1,numnp
```

```
  xx=x(1,i) !attribution des variables correspondant aux coordonnées x et y (notées xx et yy)
  yy=x(2,i) !au nœud i considéré dans la boucle.
```

```
  ! Protect initial nodes from deletion during coarsening
```

```
  protected(i) = .true. !on empêche le nettoyage des atomes durant l'adaptation automatique.
```

```
  ! Rigid boundary at y=ymax !limite rigide pour y = ymax
```

```
  if (yy.gt.ymax) then
```

```
    id(1,i)=1
```

```
    id(2,i)=1
```

```
    id(3,i)=1
```

```
  endif
```

```
  ! Rigid boundary at y=ymin !limite rigide pour y = ymin
```

```
  if (yy.lt.ymin) then
```

```
    id(1,i)=1
```

```
    id(2,i)=1
```

```
    id(3,i)=1
```

```
  endif
```

```
  ! Rigid boundary at x=xmin !limite rigide pour x = xmin
```

```
  if (xx.lt.xmin) then
```

```
    id(1,i)=1
```

```
    id(2,i)=1
```

```
    id(3,i)=1
```

```
  endif
```

```
  ! Rigid boundary at x=xmax !limite rigide pour x = xmax
```

```
  if (xx.gt.xmax) then
```

```
    id(1,i)=1
```

```
    id(2,i)=1
```

```
    id(3,i)=1
```

```
  endif
```

```
enddo
```

1.4.2.2. User_bcon

QC utilise automatiquement « prop » pour appliquer les conditions aux limites à chaque pas de charge. Avant d'invoquer le solveur, le programme QC exécute deux segments de code pour assigner les déplacements (dans mod_pload.f) aux degrés de libertés contraints (id=1) et des forces externes (dans mod_element.f) aux degrés de liberté libres (id=0). Cette partie du code est la suivante :

! Set displacements of constrained nodes

```

do i =1, numnp           !boucle sur l'ensemble des noeuds
  do j =1, ndf           !boucle sur l'ensemble des degrés de liberté des noeuds

    if (id(j, i) ==1) b(j, i) = prop*f(j, i) !déplacements assignés aux noeuds contraints
  enddo
enddo

```

! Set external forces applied to free nodes

```

do i =1, numnp
  do j =1, ndf
    if ( id(j, i) ==0) then
      dr(j, i) = prop * f(j, I)           !on impose un vecteur force aux degrés libres
    else
      dr(j, i) = 0.0_dp                   !vecteurs forces nuls pour les nœuds contraints
    endif
  enddo
enddo

```

La routine user_bcon est appelée par la macro « bcon » pour appliquer des conditions aux limites spéciales. Elle contient, dans l'exemple du cisaillement fourni avec le logiciel QC le segment de code suivant :

```
do i =1, numnp
```

On applique la boucle sur l'ensemble des noeuds (numnp).

```
b (1, i) = b (1, i) + (propfact-propolfact) * x (2, i)
```

On incrémente les déplacements nodaux sur la composante x des nœuds i **b(1, i)** (nuls initialement) sur l'ensemble des nœuds avec la charge proportionnelle (**propfact-propolfact**) en fonction de la coordonnée y du nœud considéré. En d'autres termes, plus la coordonnée selon y du nœud considéré est grande et plus le déplacement nodal imposé suivant x sera grand (condition du cisaillement). Notons qu'il s'agit d'incrémentes « proposés » qui précèdent la résolution du système.

```
if (id (1, i) ==1) f (1, i) = x (2, i)
```

On note sur cette dernière ligne la substitution de la coordonnée y par l'ensemble des conditions aux limites **f()** pour les degrés de liberté contraints (**id=1**). Ceci est nécessaire puisque tous les déplacements des degrés de liberté pour lesquels **id =1** sont réécrits à l'appel suivant pour calculer l'énergie totale et résoudre le système.

```
enddo
```

Puis commande de fin de boucle.

1.4.2.3. User_pdel et courbe charge-déplacement

Cette routine permet de calculer la force totale dans la direction x que subissent les nœuds ayant un déplacement fixe (nœuds contraints) et qui ont une coordonnée y positive. Dans ce problème, le modèle est une région rectangulaire avec une partie inférieure à $y = 0$ tenue fixe avec un déplacement nul et une région supérieure à $y = h$ tenue fixe et poussée vers les x croissants. Les seuls nœuds avec un $id = 1$ (tenue fixes) et $y > 0$ sont alors les nœuds de la partie supérieure du modèle et ce sont ces nœuds qui sont utilisés pour dessiner la courbe « force vs déplacement » décrite plus bas. Ce segment de code s'écrit de la manière suivante :

integer i

force = 0.0_dp ! force initialisée à zéro

do i = 1, numnp ! boucle sur l'ensemble des nœuds

if (id (1, i) == 1 .and. x (2,i) > 0.0_dp) force = force - dr(1,i) ! calcul de la force sur les nœuds supérieurs du modèle

enddo

A chaque pas de chargement, le fichier p-delta.pde est incrémenté (si la ligne 88 du fichier d'entrée a été correctement écrite). Ce fichier contient deux colonnes de nombre réels : la valeur courante de la charge proportionnelle (« prop »), et une mesure scalaire de la force appliquée définie par l'utilisateur. Typiquement, ce fichier est utile pour produire les courbes charge vs. déplacement. Pour une simulation donnée, l'utilisateur peut déterminer la valeur de la force appliquée qui convient en modifiant la routine « user_pdel ». Dans cet exemple, la routine se trouve dans QC/GB-example/user_gb.f, où la mesure scalaire est la somme des valeurs absolues des composantes x des forces hors équilibre appliquées sur les nœuds de la face supérieure du bi-cristal. Cette mesure permet d'estimer la contrainte appliquée (en divisant par la surface du joint de grain : longueur 397.5 \AA multipliée par la largeur 2.85 \AA). Dans ce problème de déplacement des conditions aux limites, il n'y a pas de charge appliquée, mais un certain nombre de nœud sont contraints à un déplacement imposé. Cependant, il est équivalent d'appliquer une force sur chaque nœud pour annuler exactement les forces nodales qui proviennent de la dérivée de la fonctionnelle de l'énergie de déformation. En conséquence, un ensemble de forces appliquées peut être déterminé à partir des forces hors-équilibre des nœuds contraints. A la fin de la simulation le fichier p-delta.pde peut être tracé comme suit :

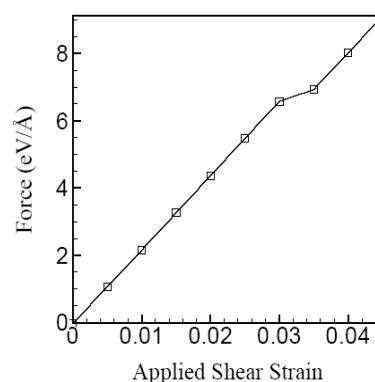


Figure 1 : déplacement imposé vs. Force. On remarque la migration du joint de grain à partir du déplacement imposé critique ($\approx 0,03$)

1.5. Essai de traction

Pour lancer une simulation QC de traction il est nécessaire de modifier légèrement le code source de l'exemple du cisaillement ainsi que le fichier d'entrée.

1.5.1. Modification du code source

Les modifications doivent se faire dans le fichier utilisateur `user_gb.f` compris dans le répertoire QC/GB-example. La routine `user_mesh` ne doit pas être modifiée, les limites rigides du modèle étant les mêmes. A la différence de l'essai de cisaillement qui nécessite l'utilisation de deux grains, la traction en utilise un seul et les limites rigides sont les mêmes dans les deux modèles. La commande matériau de définition du grain est donnée plus bas dans la description du fichier d'entrée pour la traction. La seule modification importante est à réaliser dans la routine `user_bcon` où on applique des conditions aux limites différentes. En effet, au lieu d'incrémenter les déplacements nodaux $\mathbf{b}(1, i)$ sur la composante x des nœuds en fonction de la coordonnée y du nœud considéré, on incrémente les déplacements nodaux sur la composante x des nœuds en fonction de la coordonnée x des nœuds. On obtient alors :

Au lieu de :

```
do i =1, numnp
  b (1, i) = b (1, i) + (propfact-propolfact) * x (2, i)
  if (id (1, i) ==1) f (1, i) = x (2, i)
enddo
```

Nous aurons:

```
do i =1, numnp
  b (1, i) = b (1, i) + (propfact-propolfact) * x (1, i)
  if (id (1, i) ==1) f (1, i) = x (1, i)
enddo
```

1.5.2. Fichiers d'entrée pour la traction

Deux modifications importantes sont à prendre en considération. D'une part, dans le cas du cisaillement, deux grains sont nécessaires, alors qu'un seul suffit pour la traction. D'autre part, ce grain doit faire objet d'une description détaillée en ce qui concerne les coordonnées des nœuds et leurs options associées. Dans le cas de la traction, un seul grain est à définir. Les principales modifications apparaissent ci-dessous :

```
% read in grain information
grains,direct
1
1
-0.823028 2.32787 1.42552727
0.0 0.0 0.0
1.0 0.0 0.0
0.0 1.0 0.0
0.0
20.0
4
```

-200.d0 -200.d0 F
200.d0 -200.d0 F
200.d0 200.d0 F
-200.d0 200.d0 F

2. Description des études préliminaires réalisées

2.1. Etude du cisaillement

2.1.1 Objectif de l'étude

Des études de cisaillement ont été réalisées dans le but dégager un modèle cohésif élastoplastique à l'échelle atomique qui viendrait compléter les modèles ad hoc continus développés par A. Jérusalem, L. Stainier et R. Radovitzky³, à savoir la méthode de simulation numérique directe (DNS) continue des agrégats polycristallins.

2.1.2. Aperçu de la simulation numérique directe (DNS).

Dans la théorie DNS, le polycristal est modélisé par un continuum contenant les discontinuités des orientations de réseau aux joints de grain. L'approche de calcul est basée sur une formulation éléments finis d'un Lagrangien aux grandes déformations décrivant le continuum. Les joints de grain sont représentés par des éléments idéaux à topologie plate. Chaque grain est discrétisé par un maillage fin et leurs comportements sont décrits par un modèle de plasticité cristalline basé sur l'écroissage de type « forêt » de dislocations.

L'avantage de cette technique tient à la facilité avec laquelle on peut générer un maillage structuré composé de grains unitaires. En dépit de son inaptitude à représenter des microstructures réalistes, cette approche permet de définir les géométries de façon idéale tout en conservant les propriétés basiques supposées des polycristaux.

2.1.3. Paramètres des simulations.

La surface du joint de grain a été paramétrée de façon à éviter les effets de bord. La longueur de l'interface du joint est de 800 Å et sa largeur de 2.8511 Å (comme dans l'exemple de QC). L'orientation du grain n°1 est la suivante : $\langle -1, -1, 5 \rangle$ selon x, $\langle 5, 5, 2 \rangle$ selon y (si ces vecteurs ne sont pas orthogonaux, la simulation s'arrête et un message d'erreur apparaît). L'orientation naturelle (et initiale) du grain n°2 est la même que celle du grain n°1. Un angle de désorientation de 31.58° ayant pour indice de coïncidence $\Sigma 27$ a été ensuite introduit entre les grains n°1 et n°2. Cette étude a été réalisée avec tous les matériaux et tous leurs potentiels associés présents dans la librairie de QC.

2.2. Etude de la traction.

2.2.1. Objectif de l'étude.

Trois études différentes ont été réalisées:

1. Etude de traction en fonction de l'orientation du grain. Obtention des coefficients élastiques en QC et comparaison avec les valeurs obtenues par méthode analytique et celles de la littérature. L'objectif étant de vérifier d'une

part la justesse des constantes élastiques calculées en QC et d'autre part d'évaluer les limites d'application de la méthode en traction pure, à savoir l'observation de la décohésion du matériau ou encore l'apparition d'instabilité dans la réponse du matériau soumis à ce type de contrainte.

2. Comparaison de la constante élastique C_{11} calculée en QC pour tous les potentiels et tous les matériaux de la librairie QC avec les valeurs de la littérature pour la traction d'un grain dans son orientation naturelle. L'objectif étant d'identifier les potentiels les mieux adaptés à l'étude de la traction.
3. Représentation des courbes contraintes déformation pour l'aluminium et le cuivre de façon à mettre en évidence la différence du comportement de QC selon le potentiel utilisé.

2.2.2. Constantes élastiques et orientations : méthode utilisée

Selon les notations utilisées en mécanique des matériaux les contraintes sont liées aux déformations par l'expression suivante :

$$\sigma_{ij} = \sum C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (1) \quad (\text{Notations d'Einstein : on somme sur tous les indices répétés})$$

Les C_{ijkl} sont les constantes élastiques. Elles dépendent de la symétrie du cristal considéré (cubique, hexagonal...). En symétrie cubique, seulement trois de ces constantes sont indépendantes. En effet, en notation de Voigt nous avons :

$$C_{11} = C_{22} = C_{33} \quad : \text{Module de compression axiale.}$$

$$C_{44} = C_{55} = C_{66} \quad : \text{Module de cisaillement.}$$

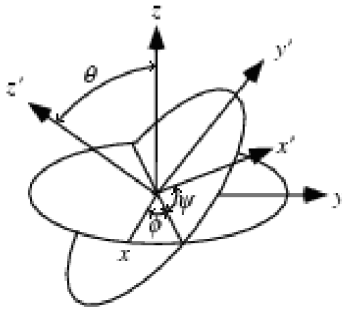
$$C_{12} = C_{13} = C_{23} \quad : \text{Module de dilatation en compression axiale.}$$

Ces constantes sont tabulées dans la littérature pour des cristaux dans leurs orientations naturelles. La question à laquelle il s'agit de répondre est de savoir ce que deviennent ces constantes lorsqu'on prend les cristaux selon une autre orientation. Pour répondre à cette question il faut exprimer les déformations et les contraintes dans le nouveau référentiel en leur appliquant un opérateur transformation des coordonnées qui a l'expression suivante :

$$\begin{aligned}
 x' &= (\cos(\Psi) \cos(\Phi) - \cos(\theta) \sin(\Phi) \sin(\Psi))x \\
 &+ (\cos(\Psi) \sin(\Phi) + \cos(\theta) \sin(\Psi) \cos(\Phi))y \\
 &+ (\sin(\theta) \sin(\Psi))z
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 y' &= (-\sin(\Psi) \cos(\Phi) - \cos(\theta) \cos(\Psi) \sin(\Phi))x \\
 &+ (-\sin(\Psi) \sin(\Phi) + \cos(\theta) \cos(\Psi) \cos(\Phi))y \\
 &+ (\sin(\theta) \cos(\Psi))z
 \end{aligned}$$

$$z' = (\sin(\theta) \sin(\Phi))x - (\sin(\theta) \sin(\Phi))y + (\cos(\theta))z$$



Pour passer d'une orientation de $\langle 1, 0, 0 \rangle$ selon x à $\langle 1, 1, 0 \rangle$ on applique une rotation de 45° . Et on aura :

$$\theta = k = 0$$

$$\phi = \frac{\pi}{4}$$

On obtient par conséquent la matrice de transformation T_{ij} suivante :

$$T_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Une fois cette matrice de transformation obtenue on exprime les déformations et les contraintes dans le nouveau système de coordonnées grâce aux relations suivantes :

$$\varepsilon'_{ij} = T_{il} T_{jm} \varepsilon_{lm} \quad (\text{Notations d'Einstein : on somme sur tous les indices répétés})$$

$$\sigma'_{ij} = T_{il} T_{jm} \sigma_{lm}$$

Ensuite on trouve l'expression des nouvelles constantes élastiques par identification avec les équations (1). Par exemple pour la rotation de 45° considérée on trouve les expressions suivantes.

$$C'_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{2} + C_{44} \quad , \quad C'_{12} = \frac{C_{11} + C_{12}}{2} - C_{44} \quad , \quad C'_{44} = C_{44}$$

2.2.3. Représentation des courbes contraintes-déformation avec différents potentiels

Les comportements en traction de l'aluminium et du cuivre selon différents potentiels ont été étudiés. Les potentiels utilisés pour le cuivre sont ceux calculés par Voter-Chen et Foiles-Baskes-Daw¹⁰. Pour l'aluminium, Voter-Chen et Ercolessi-Adams⁹.

2.2.4. Paramètres des simulations

Les caractéristiques géométriques du grain sont les suivantes ; il s'agit d'un grain carré (initialement et dans le plan (xy)) de 400 Å de côté et de 2.8511 Å de profondeur. La traction est appliquée selon l'axe des x. Tous les nœuds contraints lors des simulations ne déclenchent pas de non-localité.

3. Résultats

3.1. Traction

3.1.1. Constantes élastiques et orientations.

Le potentiel empirique utilisé est celui de Ercolessi et Adams⁹ pour l'aluminium. Les orientations qui ont fait l'objet de cette étude et les résultats en QC tirés du fichier gb_shear.out sont les suivants (les constantes sont exprimées en eV/Å³) :

Tableaux récapitulatifs des résultats :

		C ₁₁ eV/Å ³	C ₁₁ Pa(10 ¹⁰)	C ₁₂ eV/Å ³	C ₁₂ Pa(10 ¹⁰)	C ₄₄ eV/Å ³	C ₄₄ Pa(10 ¹⁰)
QC	10 0 4	0.7364	11.783	0.3883	6.2130	0.2290	3.6642
QC	110	0.7913	12.662	0.3333	5.3338	0.2290	3.6642
QC	111	0.8097	12.955	0.3516	5.6267	0.1923	3.0781
Littérature	10 0		10,82		6,13		2,85
			$C'_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{2} + C_{44}$		$C'_{12} = \frac{C_{11} + C_{12}}{2} - C_{44}$		$C'_{44} = C_{44}$
Calculs	110		12.662		5.3338		3.6642

En jaune apparaissent les résultats permettant de comparer les calculs des constantes élastiques de QC avec les valeurs de la littérature. L'écart aux valeurs de la littérature est inférieur à l'unité dans les trois cas. QC nous donne une estimation correcte des valeurs des constantes élastiques. En bleu, les calculs des constantes élastiques par QC sont en parfait accord avec les calculs analytiques.

3.1.2. Constante élastique et potentiels

Potentiels :

E-A : Ercolessi-Adams⁹.

V-C et V-C-1 : Voter-Chen.

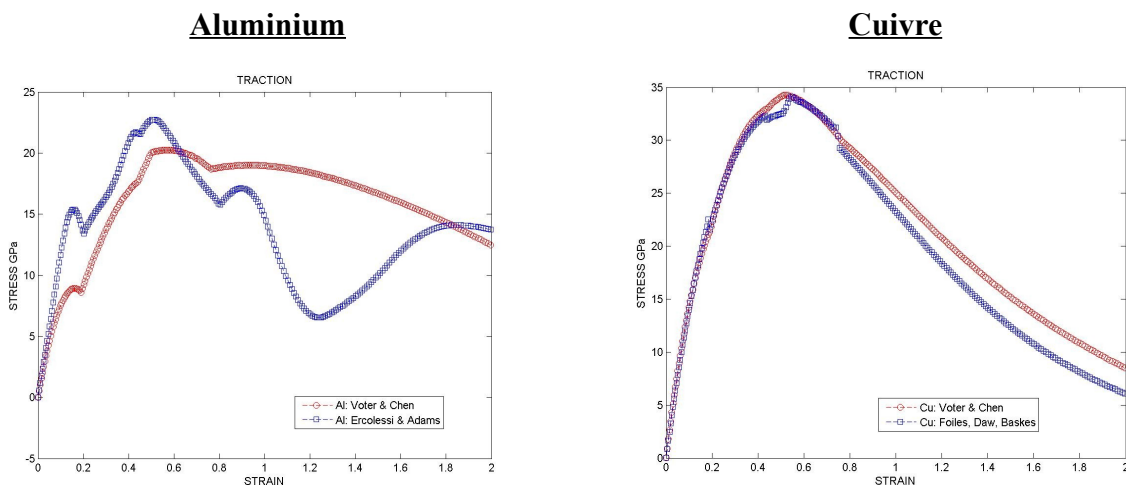
FBD3 et FBD6 : Foiles-Baskes-Daw¹⁰.

Ce tableau permet de mettre en évidence les potentiels les mieux adaptés pour le calcul des constantes élastiques en QC.

	Cuivre	Aluminium	Argent	Or	Platine	Paladium	Nickel
E-A		115,9					
V-C	172,2	100,2	118,4	178,6	308,4	222,7	232,8
V-C-1	171,5						
FBD3	161,4		123,6	174,9	289,2	208,3	225,1
FBD6	162,2		123,6	175,0	290,3	211,2	227,4
Littérature	168,4	108,2	124,0	186,0			246,5

Apparaissent en gras les potentiels les mieux adaptés.

3.1.3. Représentations des courbes contraintes-déformation en traction.



On remarque que le comportement de QC diverge au bout d'une certaine déformation. Dans les deux cas, on distingue deux parties : une partie ascendante correspondant au comportement élastique du matériau puis une partie descendante liée à la décohésion atomique. Cette deuxième partie représentant la décohésion constitue la limite de validité du calcul QC en ceci que les potentiels sont considérés comme constants au-delà d'une certaine distance interatomique et ne peuvent refléter correctement le comportement **élastique** du matériau.

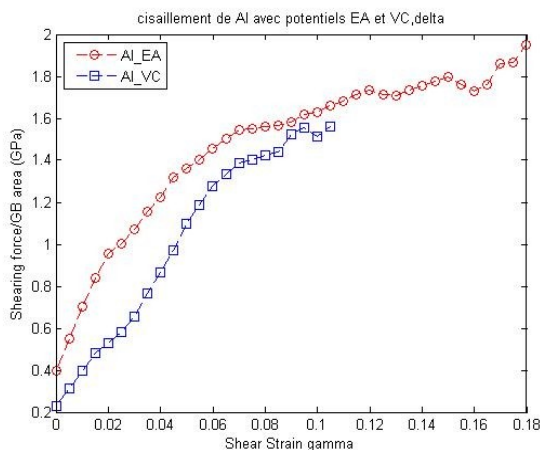
3.2. Cisaillement

3.2.1. Courbes contraintes-déformations

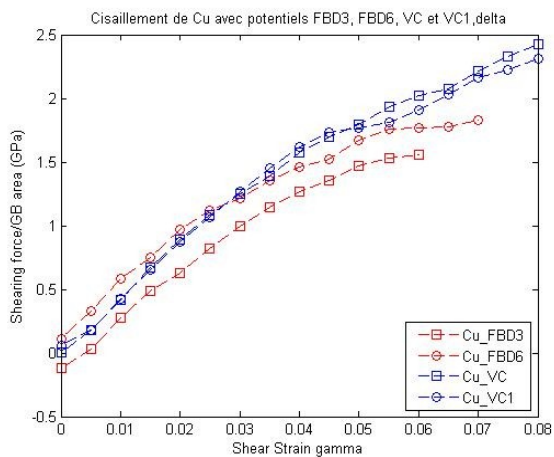
3.2.1.1 Aluminium et cuivre : comparaison avec le travail de Sansoz et Molinari¹².

Aluminium et cuivre :

Aluminium

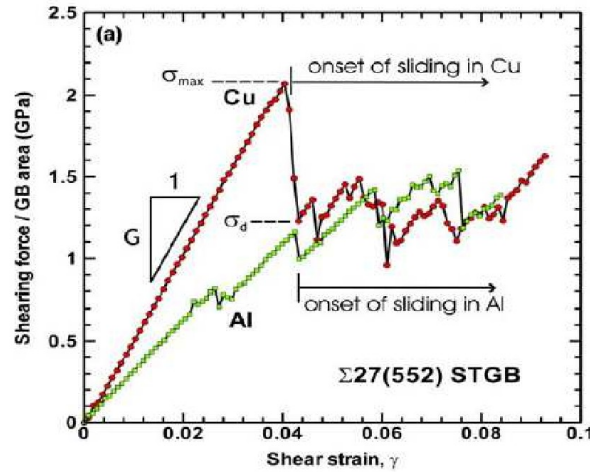


Cuivre



Aluminium et cuivre selon Sansoz et Molinari¹².

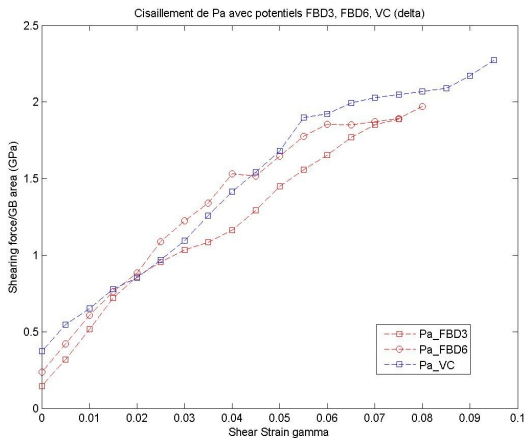
Les potentiels EAM fournis par Foiles et al¹⁰ pour le cuivre et ceux fournis par Ercolessi et Adams⁹ ont été utilisés par Sansoz et Molinari¹² pour réaliser ces essais de cisaillement. Les structures des joints de grain construites pour cette étude¹¹ ($\Sigma 27$ (552) $\langle 110 \rangle$) sont les mêmes que celles réalisées dans le cadre de ce rapport (ci-dessus).



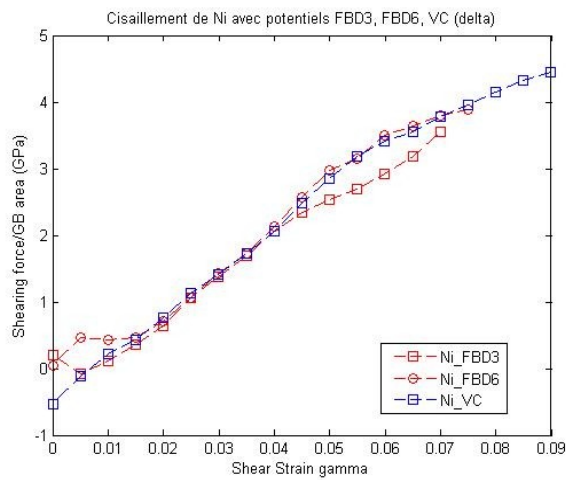
Ces deux dernières courbes obtenues par Sansoz et Molinari présentent deux caractéristiques principales. D'une part, on distingue une partie élastique linéaire jusqu'à une déformation relative de 0.04 (sensiblement identique pour les deux matériaux considérés), puis une zone d'oscillation représentant les glissements des grains les uns par rapport aux autres. Les courbes obtenues dans le cadre de ce rapport pour l'aluminium et le cuivre ne présentent pas les mêmes caractéristiques. En effet, les modules de cisaillement visibles dans les parties élastiques sont identiques pour les deux études (rapport et étude de Sansoz et Molinari) mais le démarrage du glissement apparaît de façon moins nette dans les simulations du rapport.

3.2.1.2 Palladium, Nickel, Argent, Platine, Or

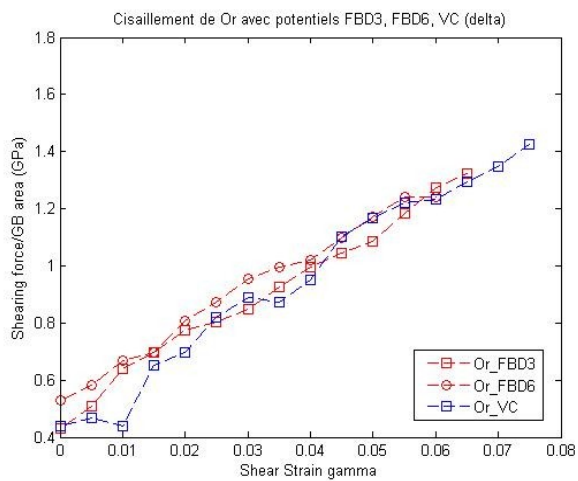
Palladium



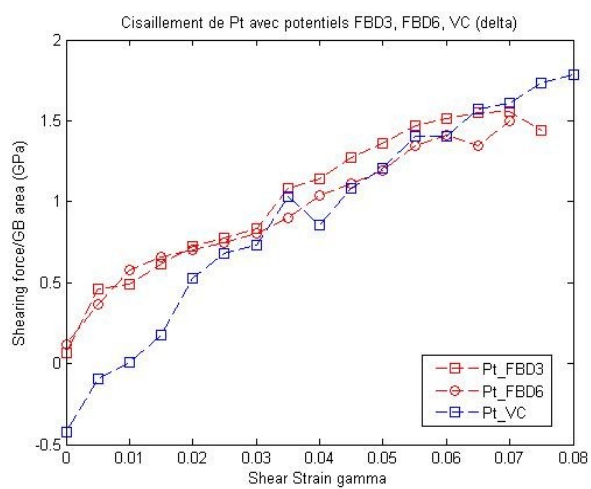
Nickel

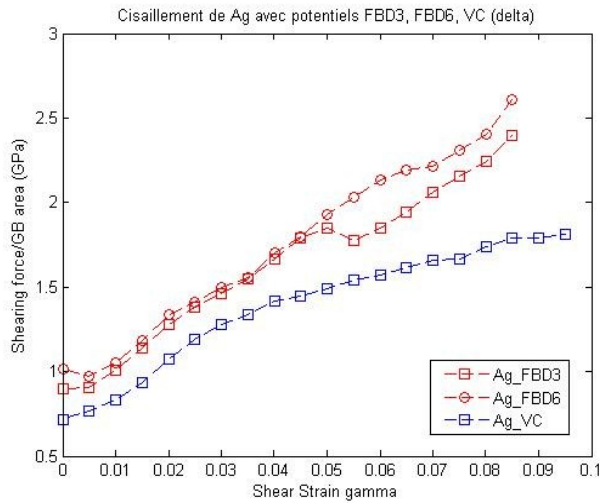


Or



Platine



Argent**3.2.2. Discussion**

Trois points importants retiennent l'attention en ce qui concerne les résultats obtenus en cisaillement. Premièrement, on remarque que les valeurs initiales des forces ne sont pas nulles à déformations nulles, ce qui correspond à un décalage du zéro des forces qu'il conviendra de régler ultérieurement. L'interface local/non-local crée des forces fantômes que les simulations réalisées dans le cadre de ce rapport n'ont pas pris en compte (option ghost-on) et qui pourrait être à l'origine de ce décalage du zéro des forces. Deuxièmement, les parties élastiques et plastiques de ces courbes ne peuvent être déterminées de façon rigoureuse, la limite d'élasticité n'apparaissant pas de façon suffisamment claire. Les limites d'élasticité seront par la suite déterminées en déchargeant, i.e, en relâchant les contraintes à partir des dernières configurations d'équilibre calculées en QC pour tous les matériaux étudiés. Troisièmement, le comportement de QC varie de façon significative selon les potentiels utilisés.

Conclusions et perspectives

Cette étude préliminaire s'est basée sur l'étude du cisaillement et de la traction afin d'une part, de vérifier la validité des calculs de QC et d'autre part d'apprécier de manière qualitative son comportement. Ces études confirment la divergence des comportements mécaniques de QC selon les potentiels utilisés. Les résultats obtenus en cisaillement ne permettent pas encore de fournir une représentation rigoureuse de la limite d'élasticité des métaux étudiés. Une étude en déchargement est à envisager pour obtenir un modèle cohésif élastoplastique des joints de grain.

Annexe 1

Programme de conversion d'un ensemble de fichiers .plt (jusqu'à 999) en fichiers .pos. Les fichiers .plt calculés par QC représentent la tension effective en chaque point du maillage.

```
PROGRAM conversion
```

```
!déclaration des variables
```

```
real, allocatable      :: b(:,:)
integer, allocatable  :: n(:,:)
integer                :: nbnoeud,nbtriangle,i,j,nfile,nfiles,nmax
character(len=25)     ch
character(len=5)      ch2
character(len=21)     ch3
character(len=3)      ch4
character(len=1)      ch5
character(len=2)      ch6
character(len=2)      ch7
character(len=2)      ch8
CHARACTER(len=1)      chs
CHARACTER(len=2)      chr
CHARACTER(len=3)      chd
```

```
ch3='View "a scalar map" {'
ch4='SP('
ch5=';'
ch6='){'
ch7='}';'
ch8='}';'
nmax=37
```

```
do i=1,9
  WRITE(chs,(I1)) i
  nfile=30+i
  nfiles=1030+i
  OPEN(nfile,file='gbshear_s00//chs//.plt',status='unknown',form='formatted')
  read(nfile,*)
  read(nfile,*)
  read(nfile,fmt=(A25,I6,A5,I6))ch,nbnoeud,ch2,nbtriangle
  open(nfiles,file='hbshear_s00//chs//.pos',status='unknown',form='formatted')
  allocate(b(1:4,1:nbnoeud))
  allocate(n(1:3,1:nbtriangle))
  b(3,1:nbnoeud)=0
  write(nfiles,fmt=(A21))ch3
  Do j=1,nbnoeud
    read(nfile,fmt=(E15.6,E15.6,E15.6)) b(1,j),b(2,j),b(4,j)
    write(nfiles,fmt=(A3,E15.6,A1,E15.6,A1,E15.6,A2,E15.6,A2))ch4,b(1,j),ch5,b(2,j),ch5,b(3,j),ch6,b(4,j),ch7
  End do
  write(nfiles,(A2))ch8
  close(nfile)
  close(nfiles)
  deallocate(b)
  deallocate(n)
enddo
```

```

if (nmax>9) then
  do i=10,99
    WRITE(chr,'(I2)') i
    nfile=30+i
    nfiles=1030+i
    OPEN(nfile,file='gbshear_s0//chr//.plt',status='unknown',form='formatted')
    read(nfile,*)
    read(nfile,*)
    read(nfile,fmt='(A25,I6,A5,I6)')ch,nbnoeud,ch2,nbtriangle
    open(nfiles,file='hbshear_s0//chr//.pos',status='unknown',form='formatted')
    allocate(b(1:4,1:nbnoeud))
    allocate(n(1:3,1:nbtriangle))
    b(3,1:nbnoeud)=0
    write(nfiles,fmt='(A21)')ch3
    Do j=1,nbnoeud
      read(nfile,fmt='(E15.6,E15.6,E15.6)') b(1,j),b(2,j),b(4,j)
      write(nfiles,fmt='(A3,E15.6,A1,E15.6,A1,E15.6,A2,E15.6,A2)')ch4,b(1,j),ch5,b(2,j),ch5,b(3,j),ch6,b(4,j),ch7
    End do
    write(nfiles,'(A2)')ch8
    close(nfile)
    close(nfiles)
    deallocate(b)
    deallocate(n)
  enddo
endif

if (nmax>99) then
  do i=100,nmax
    WRITE(chd,'(I3)') i
    nfile=30+i
    nfiles=1030+i
    OPEN(nfile,file='gbshear_s//chd//.plt',status='unknown',form='formatted')
    read(nfile,*)
    read(nfile,*)
    read(nfile,fmt='(A25,I6,A5,I6)')ch,nbnoeud,ch2,nbtriangle
    open(nfiles,file='hbshear_s//chd//.pos',status='unknown',form='formatted')
    allocate(b(1:4,1:nbnoeud))
    allocate(n(1:3,1:nbtriangle))
    b(3,1:nbnoeud)=0
    write(nfiles,fmt='(A21)')ch3
    Do j=1,nbnoeud
      read(nfile,fmt='(E15.6,E15.6,E15.6)') b(1,j),b(2,j),b(4,j)
      write(nfiles,fmt='(A3,E15.6,A1,E15.6,A1,E15.6,A2,E15.6,A2)')ch4,b(1,j),ch5,b(2,j),ch5,b(3,j),ch6,b(4,j),ch7
    End do
    write(nfiles,'(A2)')ch8
    close(nfile)
    close(nfiles)
    deallocate(b)
    deallocate(n)
  enddo
endif

END PROGRAM conversion

```

Bibliographie

1. M. Ortiz and R. Phillips, *Adv. App. Mech.* **36** (1999) p. 1.
2. V. B. Shenoy, R. Miller, E. B. Tadmor, D. Rodney, R. Phillips, M. Ortiz, *Journal of the Mechanics and Physics of solids*, 47 (1999) p. 611-642.
3. A. Jérusalem, L. Stainier and R. Radovitzky, *Phil. Mag.* **87**, n°17 (June 2007), p. 2541-2559.
4. D. Rodney and R Phillips. Structure and strength of dislocation junctions: An atomic level analysis. *Phys. Rev. Lett*, 82(8): 1704-1707, (1999).
5. E. B. Tadmor, G. S. Smith, N. Bernstein, and E. Kaxiras. Mixed finite element and atomistic formulation for complex crystals. *Phys. Rev. B*, 59(1): 235-245, (1999).
6. M. Dobson, R. S. Elliott, M. Luskin, and E. B. Tadmor. A multiplicative quasicontinuum for phase transforming materials: Cascading Cauchy born kinematics. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 2007.
7. L. M. Dupuy, E. B. Tadmor, R. E. Miller, and R. Phillips. Finite temperature quasicontinuum: Molecular dynamics without all atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 95:060202, 2005.
8. M. I. Baskes and C. F. Melius, *Phys. Rev.* **B20**, 3197 (1979).
9. F. Ercolessi and J.B. Adams, *Europhys. Lett*, **26** (8), pp. 583-588 (1994).
10. S. M. Foiles, M. I. Baskes, and Daw, *Phys. Rev. B* 33 (1986) 7983.
11. F. Sansoz, J. F. Molinari, *Thin Solid Films*, 515 (2007) 3158-3163.
12. F. Sansoz, J. F. Molinari, *Acta Materialia*, 53 (2005) 1931-1944.
13. O. C. Zienkiewicz. *The Finite Element Method*, volume 1-2. McGraw-Hill, London, 4th edition, 1991.