THESE

Présentée par

Xiangjun SHI

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR de l'UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE

Spécialité

Physique et Chimie des Matériaux

ETUDE PAR SIMULATIONS DE DYNAMIQUE DES DISLOCATIONS DES EFFETS D'IRRADIATION SUR LA PLASTICITE DE LA FERRITE A HAUTE TEMPERATURE

Soutenance prévue le 1 Décembre 2014,

devant le jury composé de :

Michel PEREZ	Professeur	INSA-LYON	Rapporteur
Robin SCHÄUBLIN	Maître d'Enseignement et de Recherche (MER)	ETHZ-LMPT	Rapporteur
Renald BRENNER	Chargé de Recherche	CNRS - IJLRA	Examinateur
Denis GRATIAS	Directeur de Recherche	CNRS - LEM	Examinateur
Ghiath MONNET	Ingénieur de Recherche (HDR)	EDF - MMC	Examinateur
Benoit DEVINCRE	Directeur de Recherche	CNRS - LEM	Directeur de thèse
Laurent DUPUY	Ingénieur de Recherche	CEA - SRMA	Encadrant
Ludovic VINCENT	Ingénieur de Recherche (HDR)	CEA - SRMA	Co-Encadrant (Invité)

Everything should be made as simple as possible, but not simpler.

Albert Einstein

Ce qui est simple est faux, ce qui est compliqué est inutilisable.

Paul Valéry

A mes grands-parents.

Remerciements

Ce travail de thèse a été effectué au sein du Département des Matériaux pour le Nucléaire (DMN) de la Direction de l'Energie Nucléaire (DEN) du CEA de Saclay, plus précisément dans le laboratoire Laboratoire d'Etude du Comportement Mécanique des Matériaux (LC2M) du Service de Recherches Métallurgiques Appliquées (SRMA).

Avant tout, je tiens à exprimer ma reconnaissance à l'ensemble des membres du jury qui m'ont fait l'honneur d'assister à ma soutenance de thèse et plus particulièrement M. Denis Gratias pour avoir présidé le jury, M. Michel Perez et M. Robin Schäublin pour avoir accepté de rapporter sur cette thèse et enfin M. Renald Brenner et M. Ghiath Monnet pour avoir accepté d'examiner ce travail.

Je souhaiterais ensuite exprimer mes premiers remerciements et mes plus profonds respects à Messieurs Laurent Dupuy, Ludovic Vincent et Benoit Devincre, pour leur travail d'encadrement et leur disponibilité, leur patience et leur soutien durant ces trois années de thèse. J'ai beaucoup bénéficié de leur compétence et de leurs vastes connaissances. Ils sont pour beaucoup dans les progrès que j'ai pu faire pendant cette période.

Je suis reconnaissant à Dmitry Terentyev et Emmanuel Clouet pour leur collaboration et pour nous avoir permis de nourrir notre modèle de DD par leurs résultats obtenus et leurs expertises dans le domaine de la simulation atomique. J'adresse également mes remerciements à Bernard Marini, Christian Robertson, Gururaj Kadiri, Maxime Sauzay et Farhad Tavassoli pour m'avoir donné de précieux conseils et des remarques pertinentes pendant ma thèse.

Je remercie tous les collègues du LC2M pour l'ambiance très agréable et amicale dont j'ai pu bénéficier pour travailler. Tout particulièrement, je souhaite remercier Louis Ziolek, qui m'a souvent dépanné sur les problèmes de matériels informatiques, Nathalie Palayan et Muriel Fine pour leurs patiences en traitant mes demandes administratives pendant ma thèse. Un grande merci à tous mes amis thésards surtout Yiting Cui et Ali Charbal pour m'avoir supporté et encouragé pendant les moments difficiles de cette thèse.

Je tiens à remercier mes nouveaux collègues du LEM de l'ONERA pour leur accueil chaleureux pendant les deux mois passés dans leur laboratoire. Je remercie notamment Alphonse Finel d'avoir su se libérer pour être mon tuteur de l'école doctorale.

Je remercie aussi les copains du club de basket, avec qui j'ai passé de très bons moments chaque mardi soir au gymnase de Moulon. Je remercie également François Daly, le président du club d'aviation et Arnaud Delmas, mon moniteur d'avion, pour leur patience et pour m'avoir fait découvrir la beauté du ciel. Ces activités à côté m'ont permis de m'aérer la tête et l'esprit devant l'écran d'ordinateur.

Je remercie tous mes amis de m'avoir aidé et supporté tout au long de ma thèse, comme Wen, Feng, Yu, Wenjing, Leopold, Jing, Siwei, Lili, Kunkun, He, Léa, Benjamin etc.

Un grand merci à Annie Houé, qui me louait la chambre dans laquelle j'ai vécu ces 3 années. C'est une tranche de vie que l'on a partagé ensemble. Le temps passe vraiment très vite mais je n'oublierai jamais tous tes aides, tes soutiens et tous les moments vécus ensemble. Egalement merci à nos 'jeunes amis' Christiane, Patrick, Geo, Françoise, Bernard et Bernadette qui ont tous été très gentils avec moi. Je vous souhaite une bonne santé et de rester toujours jeune.

Enfin, je tiens à exprimer mes profonds remerciements à mes parents et ma famille restés en Chine, de m'avoir toujours soutenu pendant ces années d'étude en France.

J'ai croisé de nombreuses personnes durant cette expérience et je voudrais terminer en remerciant toutes les personnes que j'aurais pu oublier dans ces quelques lignes.

Table des matières

Introduction générale 1

Chapitre 1 : Recherche bibliographique 4

1.1 La microstructure de l'acier de cuve 5

1.1.1 La ferrite bainitique 8

1.1.2 Les carbures 10

1.2 Les régimes du comportement mécanique de l'acier de cuve 11

1.3 Comportement mécanique des monocristaux de fer 13

1.3.1 Géométrie du glissement 14

1.3.2 Dépendance en température 16

1.3.3 Dépendance en vitesse de déformation 18

1.3.4 Dépendance en orientation 19

1.3.5 Le Glissement Dévié (GD) 22

1.3.6 L'état de la microstructure 23

1.3.7 Bilan sur le comportement mécanique du fer monocristallin non irradié 24

1.4 Les défauts d'irradiations 24

1.4.1 Les cavités 26

1.4.2 Les boucles de dislocation 27

1.4.3 Les amas d'élément d'alliage 35

1.4.4 Les précipités de Cuivre 35

1.4.5 Bilan sur les défauts d'irradiation 36

Chapitre 2 : Méthodologie 42

2.1 Place de la Dynamique des Dislocations dans une approche multi-échelles 43

2.2 Principes généraux de la Dynamique des Dislocations 44

2.2.1 Historique 44

2.2.2 Algorithme général 46

2.2.3 Conditions aux limites 53

2.2.4 Mode de contrôle des simulations dans NUMODIS 54

2.3 Introduction de boucles d'irradiation dans NUMODIS 55

2.4 Identification des paramètres rayon de cœur 'a' et tension de cœur 'α_{core}' 60

Chapitre 3 : Identification des paramètres du modèle de DD 66

3.1 La mobilité et la contrainte de seuil en littérature 67

3.2 Interaction entre une dislocation coin et les boucles de type <100> 72

3.3 Interactions de contact avec des boucles de vecteur de burgers ½< 111 >.....86

3.3.1 Hypothèses de calcul 86

3.3.2 Résultats de simulation..... 88

3.4 Interaction à longue distance avec des boucles de vecteur de burgers ½<111> 95

Chapitre 4 : Application du modèle : Résultats microscopiques et mésoscopiques.....103

4.1 Confrontation DD-MD dans le cas de nouvelles boucles <100>.....104

4.2 Influence de la taille des boucles et de la vitesse de déformation imposée 107

4.2.1 Les boucles de type <100>..... 107

4.2.2 Boucles de vecteur de Burgers ½< **111** >..... 115

4.2.3 Bilan des effets de taille et de vitesse de déformation..... 117

4.3 Interactions élémentaires entre dislocations vis et boucles d'irradiation 118

4.3.1 Interactions avec des boucles ½< **111** >..... 118

4.3.2 Interactions avec des boucles <100>..... 123

4.3.3 Bilan des simulations d'interaction entre une dislocation vis et des boucles d'irradiation ½ <111> et <100>..... 129

4.4 Simulations massives 129

Conclusion et perspective générale.....139

ANNEXE A : Le paramètre de rayon de cœur 'a'.....142

Introduction générale

1. Contexte industriel et problématique

Dans un Réacteur à Eau Pressurisée (REP) (Figure I), la cuve est un composant du circuit primaire et constitue ainsi la deuxième barrière de sûreté entre le produit actif et le milieu extérieur (la première étant les gaines en alliage de Zirconium des assemblages combustible et la troisième, l'enceinte en béton du bâtiment réacteur).

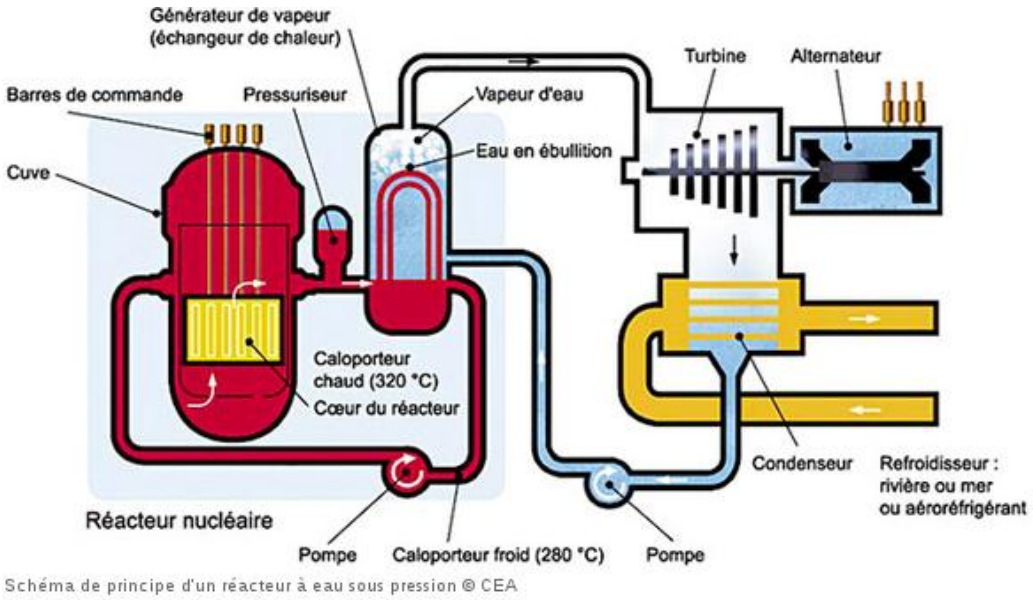
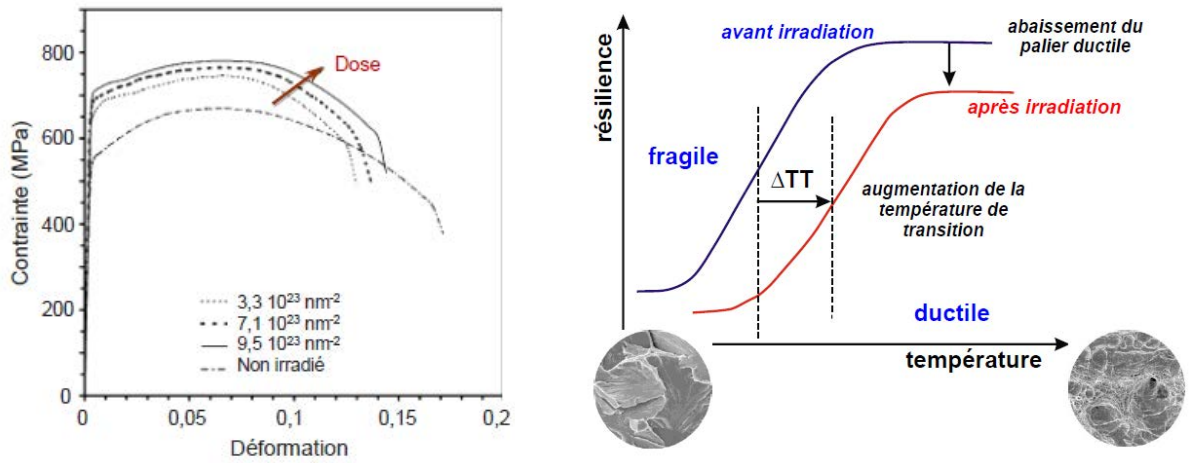


Figure I: Schéma de principe d'un réacteur à eau sous pression (source : CEA).

Un des points clés concernant l'extension de la durée de vie des centrales nucléaires réside dans la capacité à prédire l'évolution en service de la ténacité des aciers constituants la cuve du réacteur. Ces aciers sont soumis à une irradiation neutronique qui engendre des défauts à l'échelle atomique (précipités, boucles d'irradiation, cavités etc.) responsables d'un durcissement du matériau couplé à une diminution de la ductilité à l'échelle macroscopique (voir la Figure II-a).



(a) (b)

Figure II: Effet de l'irradiation sur le comportement mécanique de l'acier de cuve. (a) courbes de traction à l'ambiante [P. Haušild, M. Kytka, M. Karlík, P. Pešek, J. Nucl. Mater. 341 (2005) 184] et (b) courbes de résilience [S. Raoul, Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay (1999)].

Au-delà du durcissement observé post-irradiation, la préoccupation majeure des autorités de sûreté et de l'exploitant de la centrale est la fragilisation induite par l'irradiation. La Figure II-b illustre cette fragilisation par le décalage de la zone de transition fragile-ductile d'une courbe de ténacité vers les plus hautes températures au fur et à mesure que la dose augmente. Ce décalage de la zone de transition doit être pris en compte dans l'étude de scénarios accidentels impliquant un refroidissement rapide de la cuve et pour lesquels on cherche à se prémunir d'une rupture brutale de la cuve.

Afin de mieux comprendre le comportement mécanique des composants importants des REP sous irradiation dont la cuve, deux projets européens successifs PERFECT et PERFORM 60 ont été lancés avec pour objectif de fournir une modélisation de l'échelle atomique à l'échelle de la structure permettant de mieux appréhender le phénomène de durcissement et de fragilisation par irradiation. Dans ce cadre, la technique de la « Dynamique des Dislocations » (DD) est identifiée comme la seule méthode permettant de simuler l'évolution des propriétés plastiques du matériau en fonction des transformations microstructurales prédites par les simulations de Dynamique Moléculaire (DM) ou ab-initio aux échelles atomiques. Les travaux de recherche présentés dans ce mémoire, même s'ils ne sont pas directement reversés dans ces projets, s'inscrivent dans la même démarche.

2. Objectif de la thèse

L'objectif de cette thèse est de mettre en place par simulations de Dynamique des Dislocations (DD) tous les moyens utiles au développement d'une loi de plasticité cristalline pour le fer pur irradié (matériau cubique centré), constituée autant que possible de paramètres justifiés physiquement, et qui soit capable de reproduire au mieux les résultats expérimentaux.

Une telle loi de plasticité cristalline est actuellement en cours d'étude dans le régime de température transitoire pour le fer pur irradié [G. Monnet, L. Vincent, B. Devincre, Acta Materialia 61 (2013) 6178].

Dans la loi étudiée, les valeurs des paramètres $\alpha_{irr,loop}$ et ξ, représentant respectivement la force d'obstacles des défauts d'irradiation et leur taux d'élimination par glissement plastique, ne sont pas bien connues. Une piste explorée durant ma thèse était donc d'identifier ces paramètres en réalisant des simulations de DD prédictives, c'est-à-dire en accord avec les données connues aux échelles inférieures et prenant en compte une microstructure de défauts d'irradiation réaliste et des volumes de matériau représentatifs de vraies conditions de sollicitations mécaniques.

Avant de réaliser de telles simulations massives, il convient d'abord de s'assurer que le modèle de DD est capable de reproduire les interactions élémentaires obtenues dans la littérature à l'aide de simulations atomiques, en l'occurrence des résultats de Dynamique Moléculaire (DM). De nombreux résultats sont en effet disponibles avec cet outil sur la morphologie des interactions et les contraintes critiques associées en faisant varier les types de boucles et leur taille ou encore la vitesse de déformation imposée dans les simulations.

3. Organisation du mémoire

Le mémoire se compose de quatre chapitres :

Chapitre 1 : Une étude bibliographique sur la microstructure de l'acier de cuve, le comportement mécanique du monocristal de fer, les défauts d'irradiation et leurs effets sur le comportement mécanique du fer en insistant plus particulièrement sur les boucles de dislocation.

Chapitre 2 : Une présentation de la méthodologie suivie dans ce travail de thèse avec un accent mis sur la technique de DD en général, et sur le code NUMODIS en particulier. Une identification de certains paramètres critiques (le rayon de cœur 'a' et l'énergie de cœur 'α_{core}') sera présentée en fin de chapitre.

Chapitre 3 : Une identification des paramètres de la loi de mobilité retenue dans le modèle de DD est proposée en se basant sur une comparaison avec des résultats en DM d'interactions élémentaires entre une dislocation coin et diverses boucles d'irradiation. L'identification cherche à reproduire à la fois les mécanismes d'interactions et les niveaux de contrainte critiques nécessaires pour décrocher les dislocations de leurs obstacles.

Chapitre 4 : Une application du modèle de DD est tout d'abord proposée sur des simulations élémentaires complémentaires de celles effectuées dans le chapitre 3. Ces simulations concernent notamment l'interaction entre une dislocation vis et les mêmes types de boucles que celles simulées précédemment. Puis des simulations massives entre une dislocation coin et plusieurs types de boucles au sein d'une même boite de simulation seront finalement réalisées. Les différentes interactions entre dislocation et boucles dans ce type de simulation inaccessible aux simulations atomiques sont analysées et une première estimation de la valeur de la force d'obstacle α d'une microstructure de défauts d'irradiation réaliste est proposée.

Chapitre 1 : Recherche bibliographique

Table des matières

Introduction **5**

1.1 La microstructure de l'acier de cuve **5**

1.1.1 La ferrite bainitique 8

1.1.2 Les carbures 10

1.2 Les régimes du comportement mécanique de l'acier de cuve **11**

1.3 Comportement mécanique des monocristaux de fer **13**

1.3.1 Géométrie du glissement 14

1.3.2 Dépendance en température 16

1.3.3 Dépendance en vitesse de déformation 18

1.3.4 Dépendance en orientation 19

1.3.5 Le Glissement Dévié (GD) 22

1.3.6 L'état de la microstructure 23

1.3.7 Bilan sur le comportement mécanique du fer monocristallin non irradié 24

1.4 Les défauts d'irradiations **24**

1.4.1 Les cavités 26

1.4.2 Les boucles de dislocation 27

1.4.3 Les amas d'élément d'alliage 35

1.4.4 Les précipités de Cuivre 35

1.4.5 Bilan sur les défauts d'irradiation 36

Conclusion **38**

Bibliographie **39**

Introduction

Dans ce chapitre bibliographique, nous allons tout d'abord présenter la microstructure de l'acier de cuve après son élaboration industrielle. Les résultats de simulation atomique (DM) auxquels nous allons confronter nos résultats de Dynamique des Dislocations (DD) dans la suite de ce manuscrit ne peuvent pas intégrer toute la complexité de ce matériau industriel, et par conséquent, l'essentiel des résultats de la littérature dans ce domaine de modélisation se concentre sur l'étude du comportement mécanique de monocristaux de fer. Nous présenterons donc les principales caractéristiques de ce comportement mécanique comme la cinématique du glissement cristallin, sa dépendance à l'orientation du chargement ou encore à la température et à la vitesse de déformation.

La dernière partie de ce chapitre sera dédiée aux différents défauts d'irradiations observables dans ces matériaux (aciers de cuve et monocristaux de fer), avec un focus plus particulier sur les boucles de dislocation. Nous présenterons une synthèse de la littérature sur les différents types de réactions qui sont observées entre dislocations et boucles selon le type de chacune, ceci afin d'introduire les configurations particulières simulées dans les chapitres suivants.

1.1 La microstructure de l'acier de cuve

Les cuves des réacteurs nucléaires à eau sous pression (REP) sont constituées d'un acier (16MND5) faiblement allié contenant principalement du manganèse, du nickel et du molybdène. Sa composition chimique moyenne est indiquée dans le Tableau 1.1. Elle est comparable à celle d'autres nuances utilisées dans le nucléaire, telles que les aciers A5333B et A508 C3 aux Etats-Unis.

Tableau 1.1 Composition chimique de l'acier 16MND5 spécifiée par le code de construction français RCC-M, exprimée en % massique

DESIGNATION AFNOR 16 MN D5		
ELEMENTS	SUR COULEE EN %	SUR PIECE EN %
Carbone max.	0,20	0,22
Manganèse	1,15 - 1,55	1,15 - 1,60
Phosphore max.	0,008	0,008
Soufre max.	0,005	0,005
Silicium	0,10 - 0,30	0,10 - 0,30
Nickel	0,50 - 0,80	0,50 - 0,80
Chrome max.	0,25	0,25
Molybdène	0,45 - 0,55	0,43 - 0,57
Vanadium max.	0,01	0,01
Cuivre max.	0,08	0,08
Aluminium max.	–	0,04
max. visé	0,04	–
Cobalt max.	0,03	0,03

La cuve est composée par un assemblage de viroles qui sont obtenues par différentes opérations de forgeage. La Figure 1.1 montre les multiples parties et dimensions d'une cuve.

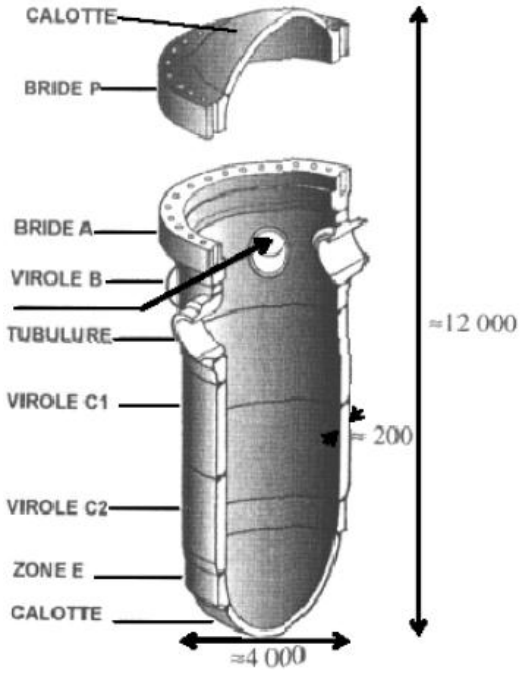


Figure 1.1 Vue en coupe d'une cuve de réacteur à eau sous pression indiquant les principales pièces et dimensions (en mm) [Carassou 2000].

Le Tableau 1.2 montre l'évolution des dimensions moyennes des cuves de réacteurs depuis le premier palier 900MWe jusqu'aux derniers réacteurs EPR (European Pressurized Reactor) en France, avec notamment une augmentation progressive du diamètre et de l'épaisseur [Rodriguez 2011] qui suit l'augmentation de la puissance des réacteurs.

Tableau 1.2 Évolution des dimensions de la cuve des réacteurs REP depuis le 900 MWe jusqu'à l'EPR.

Cuve	Diamètre intérieur (mm)	Epaisseur (mm)	Hauteur (mm)	Totale Poids
900 MWe	3900	200	13200	329 t
1300 MWe	4400	219	13600	418 t
EPR (1600 MWe)	4900	250	12700	580 t

Afin d'obtenir les propriétés mécaniques souhaitées, le matériau subit schématiquement une série de trois traitements thermiques :

- Tout d'abord un traitement d'homogénéisation qui remet en solution les carbures secondaires. Ce traitement thermique consiste en une austénitisation (900°C-6h30), une trempe (350°C) et un revenu (650°C-6h30).
- Ensuite, un traitement thermique de qualité est réalisé consistant en une deuxième austénitisation (865°C-4h), suivie d'une trempe à l'eau (25°C) et d'un revenu (650°C-5h), ceci dans le but d'affiner

la microstructure du matériau.

- Enfin, un revenu de détensionnement (615°C- 8h) est réalisé afin de relaxer les contraintes internes créées pendant l'assemblage des viroles.

Au cours des traitements thermiques, l'acier de cuve subit différentes transformations métallurgiques, qui varient d'un endroit à l'autre de la structure selon la vitesse de refroidissement observée d'après la Figure donnant le diagramme de Transformation en Refroidissement Continu (TRC) des aciers de cuve [Raoul 1999]. Les domaines de transformation des différentes phases (martensite, bainite et ferrite perlitique) sont représentés, en fonction de la température et du temps, pour des refroidissements à vitesse constante.

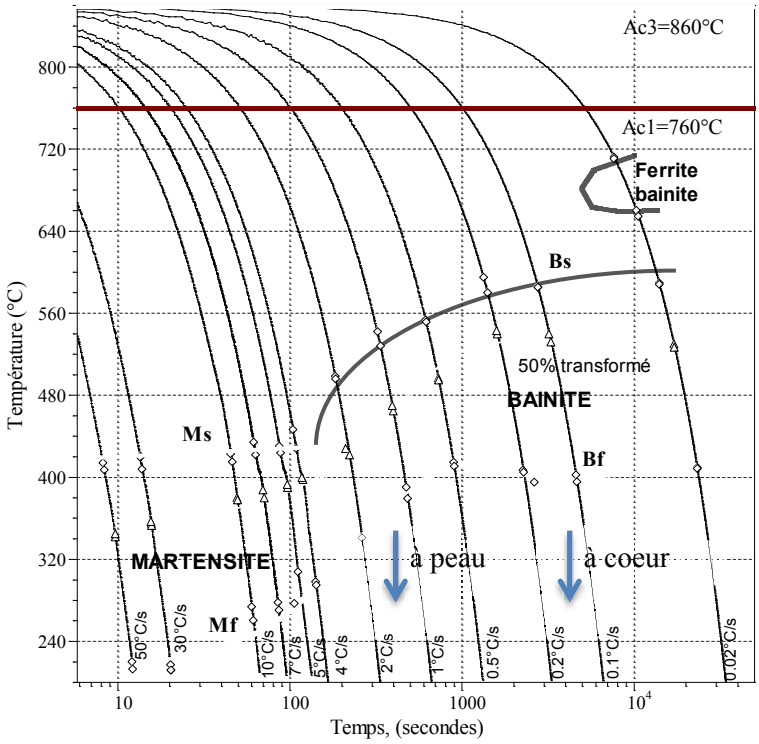


Figure 1.2 Diagramme de transformation en refroidissement continu d'un acier de cuve [Raoul 1999].

Comme la cuve est massive avec une épaisseur de plus de 20cm, le cœur et la peau de la cuve subissent des vitesses de refroidissement différentes. Le cœur est alors constitué d'environ 80% de bainite et 20% de ferrite alors que la peau est 100% bainitique.

La microstructure obtenue après cette succession de traitements est désignée comme une bainite revenue par certains auteurs [Carassou 2000, Mathieu 2006] pour rappeler les traitements thermiques subis par le matériau.

En fait, il existe plusieurs interprétations de la microstructure. La Figure 1.3 nous montre une micrographie optique de l'acier de cuve. La microstructure est parfois interprétée comme une bainite granulaire revenue constituée de ferrite pauvre en précipités avec des carbures regroupés en amas, c'est-à-dire de la ferrite aciculaire ou granulaire suivant les régions [Sestier 1998]. Dans d'autres travaux (Figure

1.4), la microstructure est décrite soit comme de la bainite supérieure (le carbone en sursaturation précipite entre les lattes de ferrite sous forme de plaquettes) soit comme de la bainite inférieure (la cémentite se forme également à l'intérieur des lattes sous forme d'aiguilles) suivant les régions observées [Miloudi 1997].

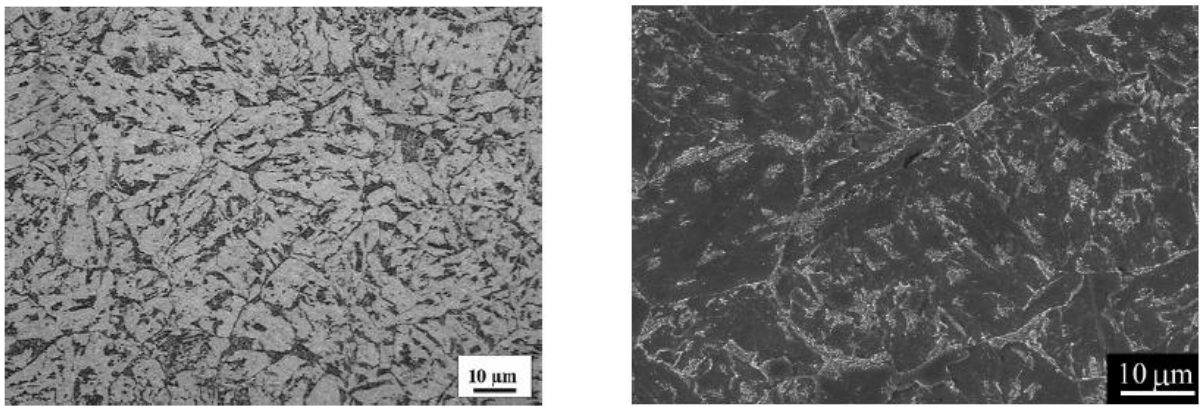


Figure 1.3 (a) Micrographie de la microstructure des aciers de cuve obtenue au microscope optique et (b) à un plus fort grossissement [Haušild 2002].

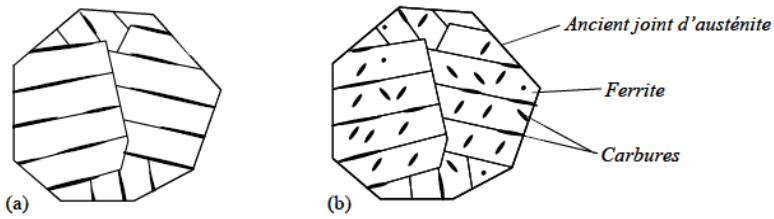


Figure 1.4 Représentation de (a) la bainite supérieure (b) la bainite inférieure. [Bhadeshia, 2000]

Certaines études récentes décrivent plutôt une microstructure composée de bainite supérieure et de ferrite aciculaire [Haušild 2002, Novaha *et al.* 2003]. Mais les différences d'interprétation de la microstructure dépendent de la complexité de la microstructure et du lieu de prélèvement des échantillons dans l'épaisseur des viroles. Dans cette partie, on ne s'intéresse qu'aux deux principaux constituants : la ferrite et les carbures. Des inclusions de sulfure de manganese MnS se trouvent également au coeur des viroles ou en peau interne mais leur fraction volumique reste très faible, de l'ordre de 0,057 % [Haušild 2002, Carassou 2000]. Etant donné cette fraction volumique, il est raisonnable de penser que ces inclusions jouent un rôle négligeable dans le comportement mécanique des aciers de cuve.

1.1.1 La ferrite bainitique

La phase ferritique de l'acier de cuve se présente sous forme de paquets de lattes bainitiques. Ils sont souvent difficilement distingués au Microscope optique ou Electronique à Balayage (MEB). D'après les

études de Haušild [Haušild 2002], la taille moyenne des paquets de lattes est de 10 µm jusqu'à 25 µm et les paquets semblent être équiaxes.

Les lattes individuelles présentent une longueur moyenne de 10 µm et une épaisseur de l'ordre de 1 à 2 µm. Ces dernières sont plus facilement observées au Microscope Electronique à Transmission (MET). Deux géométries différentes sont observées dans la littérature [Bhadeshia, 2000] (voir Figure 1.5) : sous forme de lattes allongées (*a* très supérieur à *b* et *c*), ou sous forme de plaquettes (*c* très petit comparé à *a* et *b* sur la Figure 1.5-b).

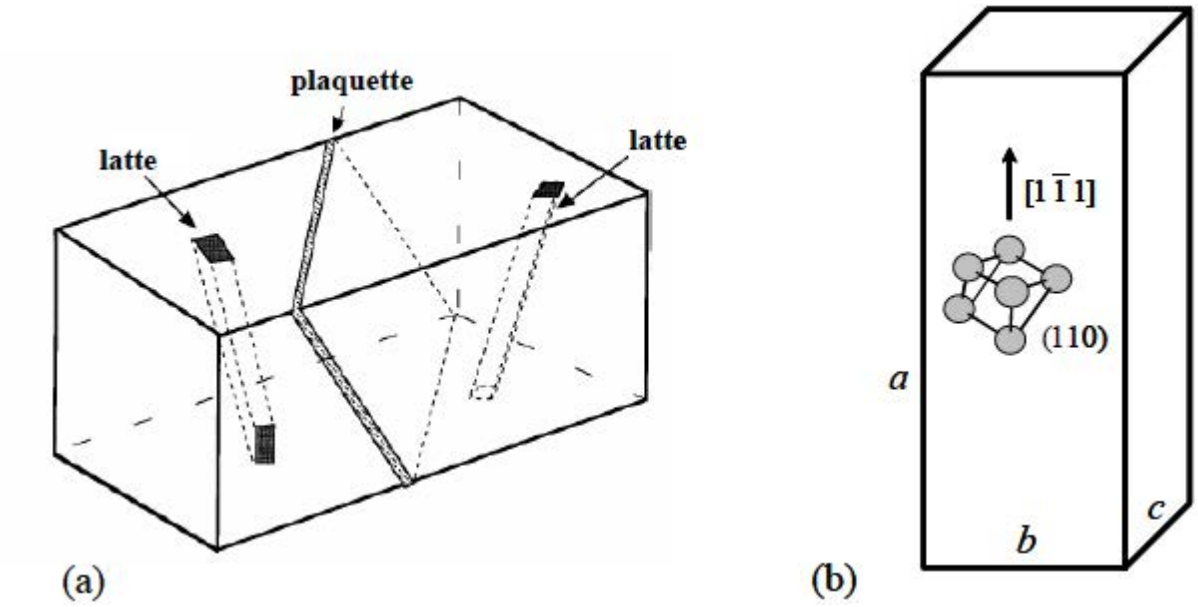


Figure 1.5 (a) Schématisation des deux formes que peut prendre la ferrite: en latte ou en plaquette [Bhadeshia, 2000], (b) Latte de ferrite d'une bainite supérieure idéalisée en parallélépipède.

La bainite supérieure est presque toujours observée sous forme de latte, alors que la bainite inférieure peut être trouvée selon les deux formes [Bhadeshia *et al.* 1990, 2000, Ohmori 1991, 2002]. Pour une bainite supérieure, la direction d'allongement (direction *a* sur la Figure 1.5-b) correspond à une direction dense du cristal de fer (α) $<111>_{\alpha}$. Le plan d'habitat de la ferrite est majoritairement observé comme étant un plan dense $\{110\}_{\alpha}$ [Bhadeshia 2000].

En plus, le Tableau 1.3 résumé par D.G. Rodriguez [Rodriguez 2011] montre qu'il y a une différence marquée sur les désorientations des lattes au sein d'un même paquet (<15º) et celles entre paquets différents (~ 50-60º).

Tableau 1.3 Mesures de désorientation des lattes de bainite dans un même paquet cristallographique et dans des paquets différents pour l'acier 16MND5 des viroles de cuve REP.

Observation	Étude	Type de bainite	Estimation
Désorientation des lattes dans un paquet	[Bouyne 1999]	Supérieure	< 8°
	[Gourgues *et al.* 2000]	Inférieure	< 7°
		Supérieure	< 17°
	[Haušild 2002]	Supérieure	< 17°
	[Diawara 2007]	Inférieure	<0.8°
	[Robertson *et al.* 2007]	Supérieure	<5°
Désorientation des lattes entre paquets différents	[Bouyne 1999]	Supérieure	50° - 60° (pic à 55° et 60°)
	[Gourgues *et al.* 2000]	Inférieure	50° - 60° (pic à 60°)
		Supérieure	47° - 60° (pics à 55° et 60°)
	[Haušild 2002]	Supérieure	48° - 60° (pics à 50°, 55° et 58°)
	[Diawara 2007]	Inférieure	50° - 60°

1.1.2 Les carbures

Les carbures dans les aciers de cuve sont essentiellement composés de cémentite [Carassou 2000] et sont le deuxième constituant principal de la microstructure. La composition des carbures est Fe_xC, x variant entre 2 et 3 [Mathieu 2006]. Des mesures par microanalyse X ont montré que la cémentite contient aussi du manganèse, du chrome et du molybdène [Martin 1990].

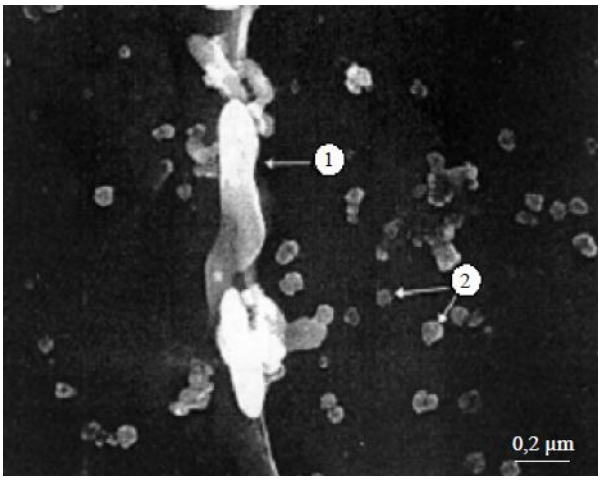


Figure 1.6 Carbures observés au MEB dans l'acier de cuve, ① sur les anciens joints de grain austénitiques et ② dans la ferrite, [Carassou 2000].

La répartition de carbures dans l'acier de cuve est très hétérogène. Les carbures repartis aux anciens joints austénitiques (① dans la Figure 1.6) sont de formes allongées, d'une épaisseur de l'ordre de 0,2 µm et de longueur pouvant atteindre entre 1 et 2 µm. Entres les paquets de lattes de ferrite, il existe aussi des

carbures (② dans la Figure 1.6) de forme sphéroïdales ou en aiguille. On les trouve soit en amas de taille environ 3 à 4 µm, soit isolés et de taille moyenne environ 0,1 µm.

Une densité moyenne de 3.10^{19} m^{-3} est estimée par [Queyreau 2008] dans les lattes de ferrite à travers trois clichés élaborés au MEB [Monnet 2006]. C'est cette valeur de densité moyenne qui est utilisée par [Naamane 2008] pour déterminer le durcissement induit par les carbures au moyen de simulations en Dynamique des Dislocations (DD).

Pour conclure, la Figure 1.7 ci-dessous présente une synthèse de la microstructure de l'acier de cuve :

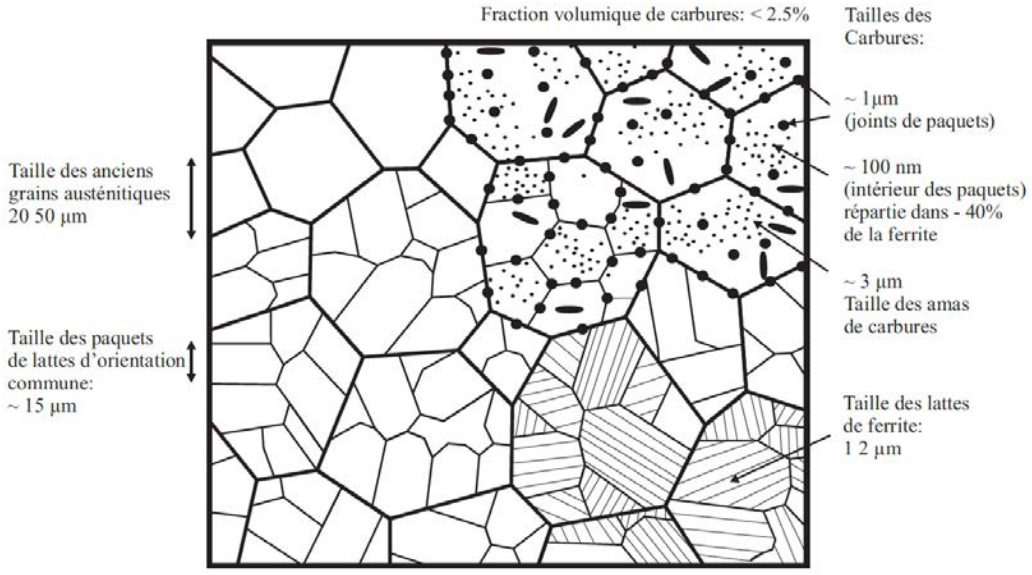


Figure 1.7 Représentation synthétique des dimensions caractéristiques de la microstructure [Mathieu 2006]

1.2 Les régimes du comportement mécanique de l'acier de cuve

D'après de nombreuses études expérimentales réalisées à l'échelle macroscopique sur le comportement mécanique de l'acier de cuve (Renevey 1997, Carassou 2000, Tanguy 2001, Haušild 2002, Mathieu 2006, Libert 2007), on observe comme dans la plupart des métaux cubique centré (CC), deux principaux régimes de comportement mécanique qui dépendent de la température (et dans une moindre mesure de la vitesse de déformation) : le régime athermique (à haute température) et le régime de déformation thermiquement activé (à basse température).

Pour le fer non irradié, la température de transition entre les deux régimes est d'environ 300K avec une vitesse de déformation typique de 10^{-4} s^{-1} (Mathieu 2006, Libert 2007).

On vérifie facilement que dans le régime thermiquement activé, la contrainte de déformation augmente beaucoup en diminuant la température, ce qui est illustré sur la Figure 1.8 ci-dessous :

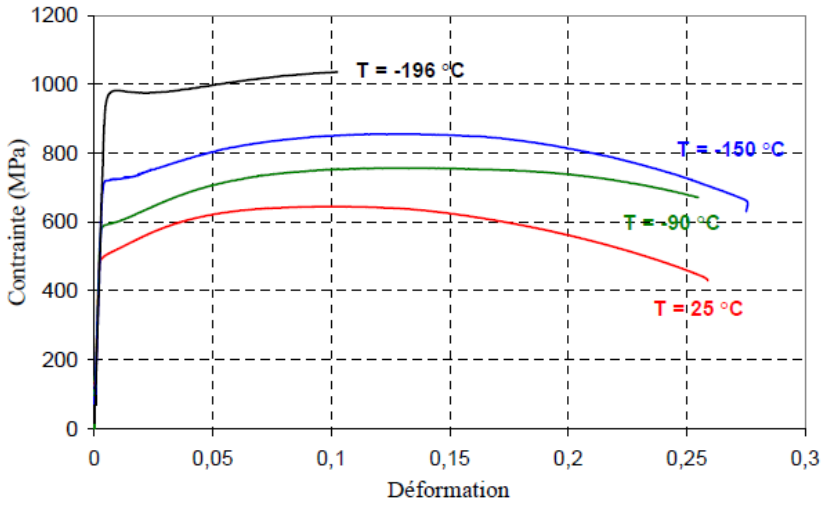


Figure 1.8 Courbes de traction conventionnelle d'un acier de cuve déformé à des températures inférieures à la température ambiante avec une vitesse de déformation 5.10^{-4} s^{-1} [Libert 2007].

Dans le régime athermique, le mode de ruine du matériau est ductile à cupules, alors que dans le régime basse-température et en présence d'une forte triaxialité, le matériau peut se rompre de manière fragile par clivage.

Cette différence de comportement et de résistance du matériau à la fissuration en fonction de la température se traduit par une évolution caractéristique de la ténacité du matériau (Figure 1.9). Sur cette même figure, on constate également que l'irradiation du matériau conduit à un décalage vers les hautes températures de la zone de transition ductile – fragile. Ce décalage, ou fragilisation par l'irradiation, est pour une bonne partie lié au durcissement du matériau sous irradiation, lui-même provoqué par l'apparition dans la microstructure du matériau de défauts microscopiques qui se comportent comme autant d'obstacles au mouvement des dislocations.

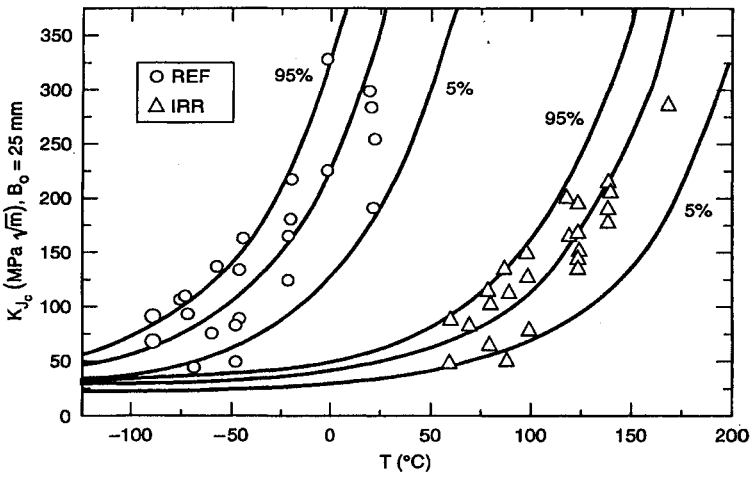


Figure 1.9 Evolution en fonction de la température de la ténacité d'un acier de cuve à l'état vierge et irradié : Point rond présente la donnée avant l'irradiation et le triangle est la donnée après l'irradiation[Mc Cabe *et al.* 1998].

1.3 Comportement mécanique des monocristaux de fer

Etant donné que l'origine du durcissement du matériau par irradiation se joue à l'échelle de la microstructure de dislocations, il est sensé de recourir à une modélisation multi-échelles pour prédire le comportement plastique et l'endommagement des aciers de cuve à l'échelle macroscopique. Toutefois, la complexité du matériau évoquée dans la partie 1.1 de ce chapitre ne peut malheureusement pas être pleinement prise en compte dans ce type de démarche et de nombreuses hypothèses simplificatrices doivent être faites (et validées) à chaque échelle de la modélisation.

Notre étude se concentre sur l'échelle microscopique, siège de l'interaction entre dislocations et défauts d'irradiation. A cette échelle, l'essentiel des travaux tant numériques qu'expérimentaux accessibles dans la littérature porte sur des monocristaux de fer pur et nous réaliserons donc nos simulations sur ce type de matériau modèle à défaut de pouvoir simuler et se comparer à des résultats sur un matériau industriel.

C'est pourquoi dans cette partie nous nous intéressons plus particulièrement aux propriétés du monocristal de fer. Ce métal présente une structure Cubique Centrée (en anglais : Body Centred Cubic, BCC). Dans cette structure, les atomes sont situés aux 8 sommets d'un cube et au centre du cube comme représenté dans la Figure 1.10 ci-dessous :

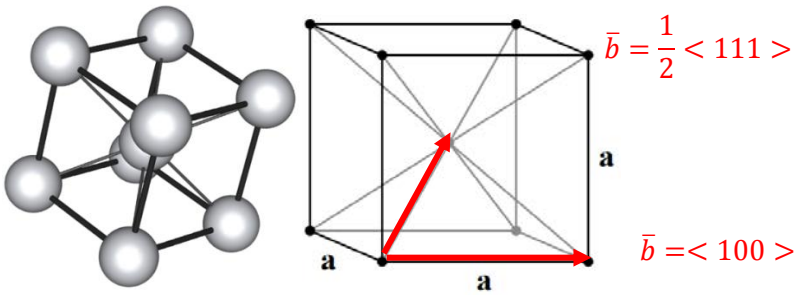


Figure 1.10 La structure cristalline Cubique Centrée

En général, les vecteurs de Burgers des dislocations dans les matériaux CC sont de type ½ <111> dans la direction dense <111>. Hull *et al.* [Hull *et al.* 2001] ont indiqué qu'un autre type de vecteurs de Burgers <100> a aussi pu être observé dans des réseaux de dislocations. Il n'est cependant pas encore clairement établi si ces dernières dislocations appartiennent à un système de glissement contribuant à la déformation plastique ou si elles résultent seulement de réactions entre dislocations de vecteur de Burgers ½<111>.

La plasticité du fer monocristallin est fonction de certains paramètres comme les systèmes de glissement, la température, la vitesse de déformation, l'orientation du chargement, le glissement dévié et aussi l'état de la microstructure. Dans les paragraphes suivants, nous allons détailler l'influence de chacun de ces paramètres.

1.3.1 Géométrie du glissement

La caractérisation des systèmes de glissement dans les matériaux cubiques centrés reste encore difficile, notamment à cause de la difficulté de réaliser des observations au Microscope Electronique à Transmission (MET) dans le fer. Même si on sait bien que la direction de glissement observée est généralement dans une direction dense <111> de la structure CC, plusieurs plans de glissement sont proposés dans la littérature.

D'après les observations des traces macroscopiques de glissement, deux théories sont généralement proposées : le glissement cristallographique [Bilger 1966] et le glissement non cristallographique [Vogel *et al.* 1953, Duesbery 1991, Honeycombe 1968, Šesták *et al.* 1971]. La première suggère que le glissement se produit sur des plans {110}, {112} ainsi que {123} avec la direction de cisaillement <111>. La dernière suggère que le glissement se produit sur des plans proches du plan de cission critique maximum. Mais comme on peut le constater dans la Figure 1.11 [Queyreau 2008], les projections des différents plans envisagés pour le glissement suivant la direction de glissement sont assez proches.

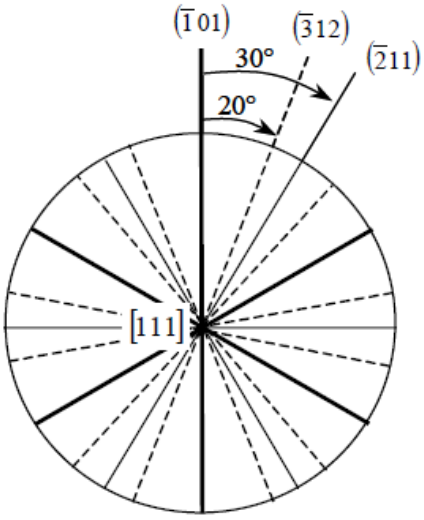


Figure 1.11 Projection des plans {110}, {112} ainsi que {123} suivant l'axe [111]

Suivant ce constat, les auteurs [Taoka *et al.* 1964, Takeuchi *et al.* 1967, Franciosi 1983] ont émis une troisième proposition que l'on utilise souvent : le glissement sur le plan {123} ou non cristallographique est composé des glissements sur des plans de famille {110} et puis {112}. La Figure 1.12 nous montre que les lignes observées peuvent être décomposées en deux orientations distinctes, qui correspondent bien aux traces des plans {110} et d'un plan {112}.

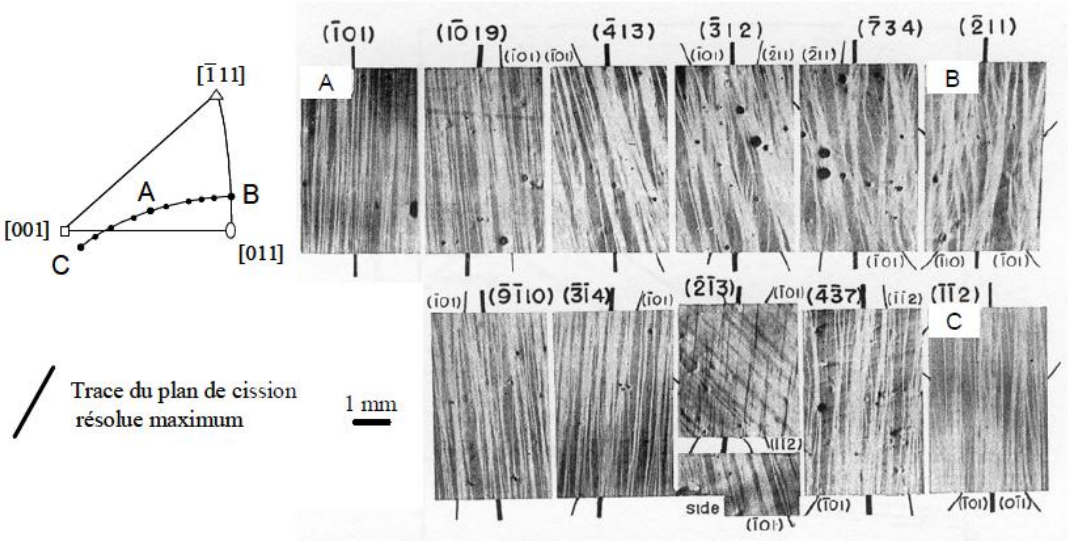


Figure 1.12 Lignes de glissement macroscopiques observées après quelques pourcents de déformation suivant différentes orientations [Taoka *et al.* 1964]

De plus, dans le Tableau 1.4 qui reproduit une synthèse faite par [Naamane 2008] des différents résultats expérimentaux de la littérature sur matériaux BCC, on peut constater que le plan {110} est cité dans toutes les observations tandis que le plan {112} est cité en deuxième lieu uniquement pour quelques matériaux de cette sélection.

Tableau 1.4 Les systèmes du glissement actifs observés à basse température pour quelques matériaux CC.

Matériaux CC	Plans de glissement observés	Références
Ta	{110}	[Ferriss 1962 – Mitchell 1965]
	{110} et {112}	[Takeuchi 1972]
Nb	{110}	[Mitchell 1963 – Louchet 1975]
	{110} et {112}	[Taylor 1965 – Reid 1966 – Bowen 1967]
Mo	{110} et {112}	[Irwin 1974 – Šestak 1979]
W	{110}	[Schadler 1960 – Garlick 1964]
	{110} et {112}	[Šestak 1979]
Fe	{110}	[Cox 1956 – Šestak 1979]
	{110} et {112}	[Spitzig 1970c]
Fe-Ti	{110} et {112}	[Spitzig 1973]
	{110} et {112}	[Spitzig 1980]
Fe-Si	{110}	[Hull 1963 – Taoka 1964 – Šestak 1979]

En revanche, les auteurs [Robertson *et al.* 2007] montrent que l'identification des plans de glissement ne peut pas non plus être réalisée par l'étude des traces macroscopiques de glissement, ces dernières étant trop sinueuses.

Une autre technique pour nous permettre d'accéder à ces informations est la Dynamique Moléculaire (DM) qui permet de suivre la trajectoire d'un ensemble d'atomes dans le cadre de la mécanique Newtonienne classique. On peut ainsi considérer la DM comme une expérience virtuelle donnant accès à des phénomènes à l'échelle atomique, tels que l'évolution des déplacements collectifs (étude des plans de glissement et de la mobilité des dislocations par exemple) ou les interactions entre une dislocation et un défaut d'irradiation.

Les études les plus récentes faites par simulations en DM [Monnet *et al.* 2009, Terentyev *et al.* 2010a, 2012, Queyreau *et al.* 2011, Kuksin *et al.* 2013] suggèrent que les systèmes de glissement sont finalement plus nombreux que ceux observés expérimentalement. Dans la direction de glissement <111>, les plans de glissement de type {110}, {112} et {123} sont autant activés les uns que les autres dans le régime athermique. Par ailleurs, les plans de type {110} sont aussi des plans de glissement possibles avec un cisaillement élémentaire de type <100>. Une recherche plus détaillée sur les systèmes de glissement ainsi que leur mobilité sera présentée dans le chapitre 3 de ce manuscrit.

1.3.2 Dépendance en température

Comme évoqué précédemment, il existe deux régimes de comportement plastiques qui dépendent de la température et aussi de la vitesse de déformation. La Figure 1.13 [Naamane 2008] nous montre que la cission critique d'activation de la plasticité $R_{0,2\%}$ dépend beaucoup de la température pour des monocristaux de fer.

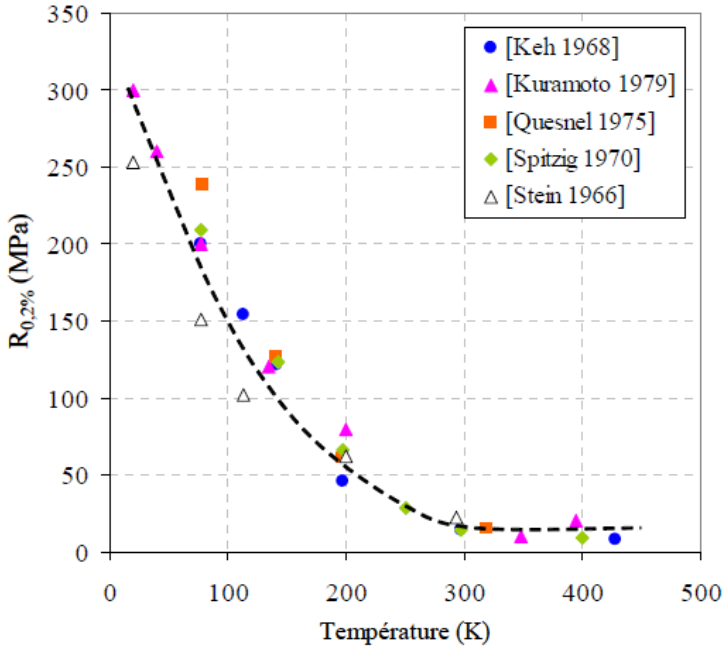


Figure 1.13 Variation de la cission critique, $R_{0,2\%}$ avec la température pour des monocristaux de fer déformés à une vitesse de l'ordre de 10^{-4} s^{-1}, [Naamane 2008].

D'après [Naamane 2008], la limite conventionnelle à 0,2% ne représente pas correctement la contrainte critique d'activation de la plasticité à basse température. Il est en effet connu que, dans ce régime de température, la plasticité est contrôlée par la mobilité des vis, et avant d'atteindre la limite d'élasticité vraie, il existe un long stade 0 de déformation contrôlé par le glissement de nombreux segments de dislocation coin (Figure 1.14) :

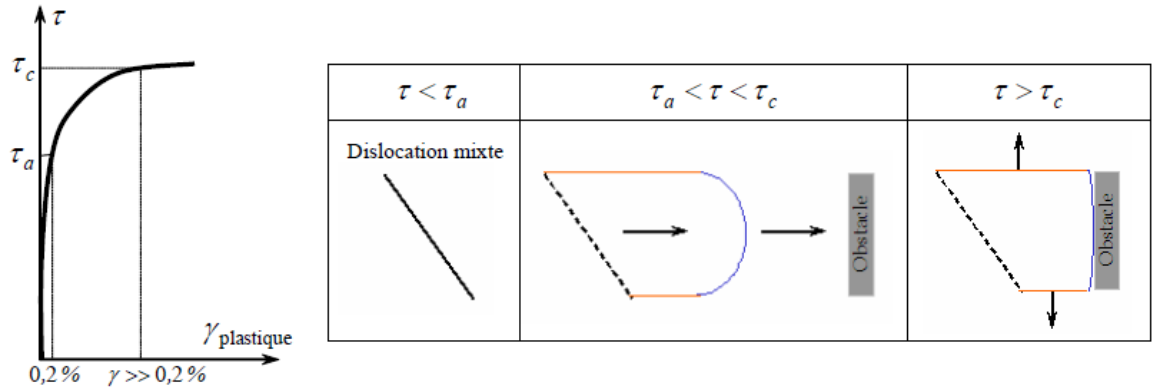


Figure 1.14 Fonctionnement d'une source de Frank-Read dans le fer déformé à basse température [Naamane 2008]

Par ailleurs, dans le régime athermique, il existe une très faible diminution des cissions critiques laquelle ne dépend que de la baisse du module de cisaillement avec la hausse de la température. Même si la différence des cissions critiques reste faible, la courbe de contrainte déformation à trois stades nous montre qu'il y a quand même une influence de la température dans ce régime : une réduction de la longueur du premier stade et une diminution de la contrainte du stade III. Ces deux effets doivent être reliés à l'activation plus facile des mécanismes de relaxation quand on augmente la température et notamment le glissement dévié (cross-slip en anglais).

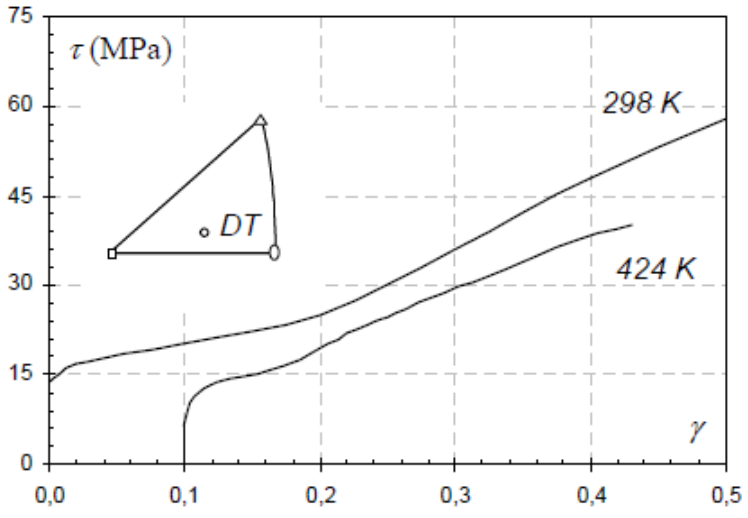


Figure 1.15 Effet de la température sur l'allure des courbes de déformation pour des cristaux orientés en glissement simple sur les systèmes {110} [Keh *et al.*1967].

Dans ce travail de thèse, nous resterons dans le régime athermique et nous négligerons toute influence de la température sur le comportement du matériau. Par conséquent, la température n'est pas introduite comme un paramètre de modélisation.

1.3.3 Dépendance en vitesse de déformation

Le comportement du matériau ne dépend pas seulement de la température mais également de la vitesse de déformation. L'auteur [Takeuchi 1968] montre que la contrainte critique augmente quand la vitesse de déformation augmente à même température.

On peut définir la sensibilité à la vitesse de déformation à l'aide de l'expression suivante:

$$S = -\frac{\Delta\tau}{ln(\dot{\varepsilon}_2 / \dot{\varepsilon}_1)}$$

Où $\dot{\varepsilon}_1$ et $\dot{\varepsilon}_2$ sont les vitesses de déformation imposées et $\Delta\tau$ la variation de la contrainte critique résultant de la variation de la vitesse de déformation.

Sur la Figure 1.16 extrait de la thèse de Naamane [Naamane 2008], on observe que la sensibilité la plus grande à la vitesse de déformation se situe au niveau de températures intermédiaires, ce qui est aussi illustré par la Figure 1.17 [Keh *et al.*1967].

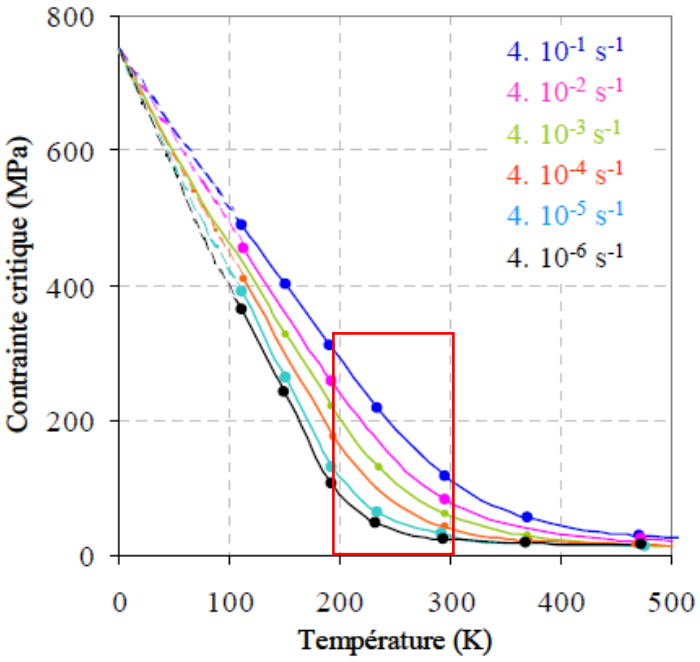


Figure 1.16 Variation de la limite proportionnelle avec la température pour les vitesses de déformation différentes. [Naamane 2008]

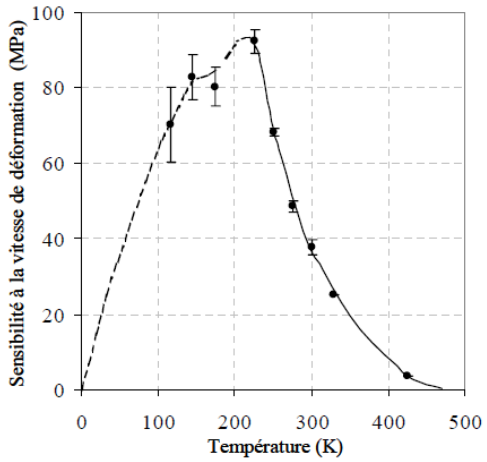


Figure 1.17 Sensibilité à la vitesse de déformation en fonction de la température [Keh *et al.*1967]

Dans notre étude, nous allons étudier les effets de la vitesse de déformation au régime athermique à partir de la température de 300K où la sensibilité commence à diminuer d'après la Figure 1.17. Il faut noter que nos simulations de DD réalisées avec le code NUMODIS nous montrent qu'une variation de la vitesse de déformation n'influence pas seulement la contrainte critique mais aussi les mécanismes de réaction existant entre dislocations et défauts d'irradiation.

1.3.4 Dépendance en orientation

L'influence de l'orientation du chargement dans le comportement du fer ou des matériaux de structure CC est beaucoup étudiée dans la littérature. En général, les systèmes de glissement activés dépendent beaucoup de la direction de chargement. La Figure 1.18 nous montre le domaine d'activation des systèmes de glissements dans le triangle standard avec l'hypothèse d'égalité des cissions critiques de chaque famille [Franciosi 1983].

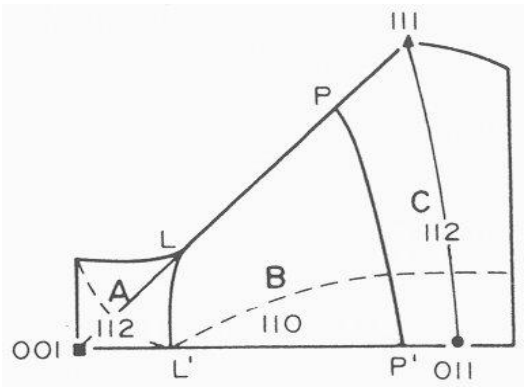


Figure 1.18 Domaines d'activation des systèmes de plans {110} et {112} dans le triangle standard [Franciosi 1983]. On rappelle ici qu'il y a une asymétrie dans le glissement des systèmes {112} : le maclage (le domaine A) et l'anti-maclage (le domaine C). Dans le domaine B, le glissement des systèmes {110} est plus facile.

Selon le type de système activé, le niveau de la contrainte critique et aussi la forme de la courbe de comportement obtenu vont différer (Figure 1.19) [Spitzig *et al.* 1970] :

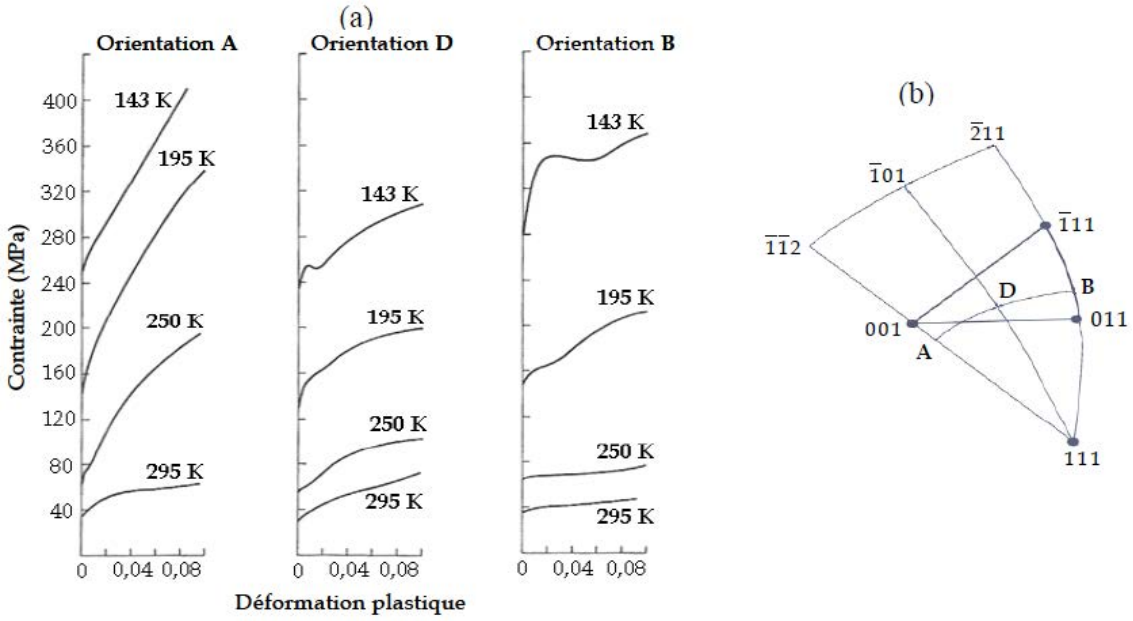


Figure 1.19 (a) Portion initiale de la courbe de déformation pour trois orientations de monocristaux de fer déformés à différentes températures ($\varepsilon = 5{,}6.10^{-4}\ s^{-1}$), (b) Repérage des trois orientations dans le triangle standard

Les directions de chargement dans le triangle standard sont souvent définies par deux angles (χ, φ) reportés sur la Figure 1.20 : χ est l'angle entre le plan de cission résolue maximale et le plan de référence (101), φ est l'angle entre la direction de traction et la frontière [001]-[011].

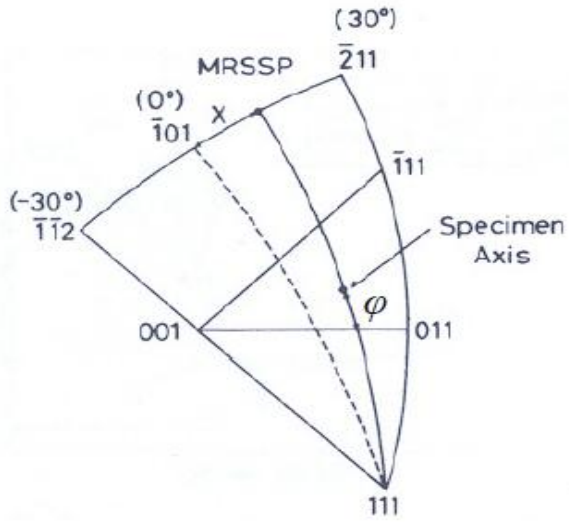


Figure 1.20 La direction de traction est repérée dans le triangle standard par les angles (χ, φ) [Kumagai *et al.* 1990]

Les deux figures suivantes montrent l'influence sur les courbes contrainte-déformation de ces deux angles à température T=333 K [Kumagai 1990] :

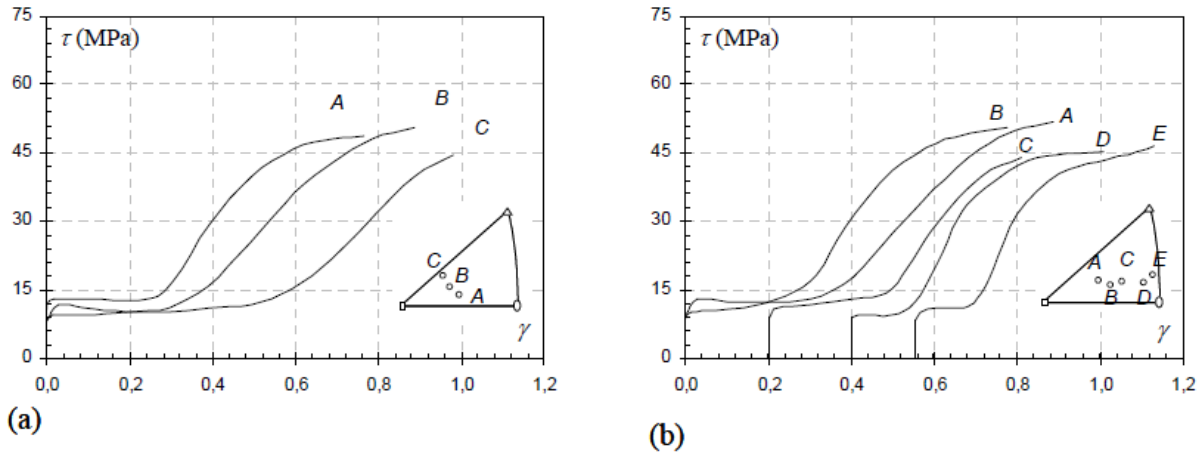


Figure 1.21 Influence de l'orientation du chargement sur les courbes cission résolue – glissement en condition de glissement simple sur un système {110}, (a) effet de l'angle φ, (b) effet de l'angle χ [Kumagai 1990]

Si on définit un rapport $\tau/\tau_{(\bar{1}01)}$ entre la contrainte critique sur le plan de glissement observé et la contrainte critique sur le plan de référence, la Figure 1.22 nous montre la variation du rapport en fonction de l'angle χ pour différentes températures [Spitzig *et al.* 1970b].

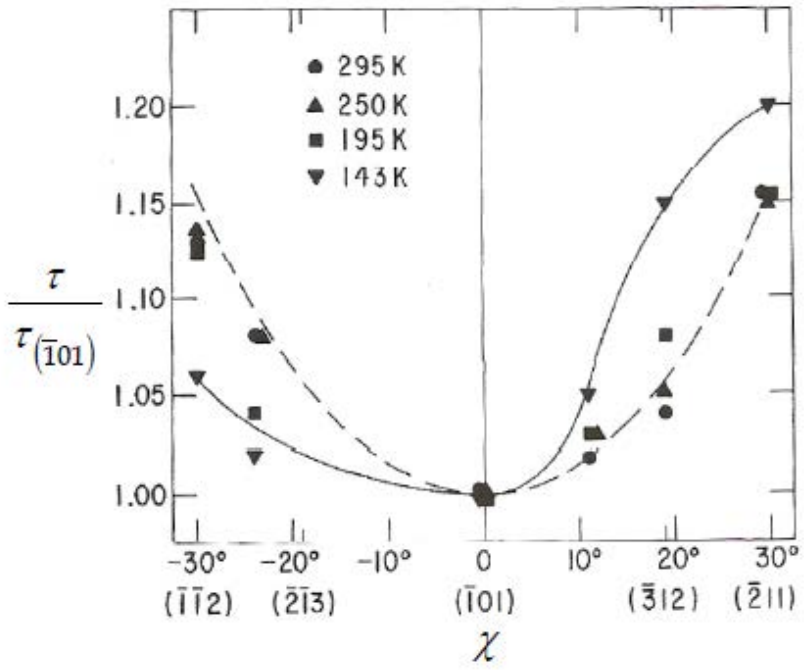


Figure 1.22 Dépendance de la contrainte critique en orientation et en température pour un monocristal de fer ($\dot{\varepsilon}$=5,6.10^{-4} s^{-1}) [Spitzig *et al.*1970]

On retrouve l'asymétrie de la contrainte critique évoquée précédemment entre le plan de glissement $(\bar{2}11)$ et le plan de glissement $(\bar{1}\bar{1}2)$ pour T=143K. Cette asymétrie diminue sensiblement à température plus élevée. En général, la contrainte critique sur les plans {110} est la plus faible d'après la majorité des études, et elle ne diffère de celle des plans {112} dans le sens facile que d'environ 10% contre 15 % dans le sens d'anti-maclage.

Tableau 1.5 Ratios des cissions critiques des deux familles obtenus dans la littérature. [Queyreau 2008]

	$\tau_0^{\{112\}}/\tau_0^{\{110\}}$ sens facile	$\tau_0^{\{112\}}/\tau_0^{\{110\}}$ sens difficile
Franciosi *et al.* 1983	1,05	1,14
Spitzig et Keh 1970b	1,13	1,16
Takeuchi *et al.* 1967	1,15	1,3
Taoka *et al.* 1964	1,05	1,11

1.3.5 Le Glissement Dévié (GD)

Dans les matériaux de structure CC et surtout dans le fer, le glissement dévié (GD), qui est un mécanisme de changement de plan de glissement par les dislocations vis, est facile. Prenons par exemple une dislocation dont le vecteur de Burgers est $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ et qui glisse initialement dans un plan (011). Cette dislocation peut théoriquement, selon le chargement qu'elle subit, changer de plan de glissement et prendre un plan parmi deux plans de type {110} : (101) ou $(1\bar{1}0)$, et trois plans de type {112} : (112), $(\bar{1}21)$ et $(2\bar{1}1)$ [Van Der Walt 1969].

En accord avec les calculs ab initio [Ventelon *et al.* 2010], les études récentes par Dynamique Moléculaire (DM) [Domain *et al.* 2005, Chaussidon *et al.* 2006] mettent en évidence une structure compacte du cœur des vis (Figure 1.23).

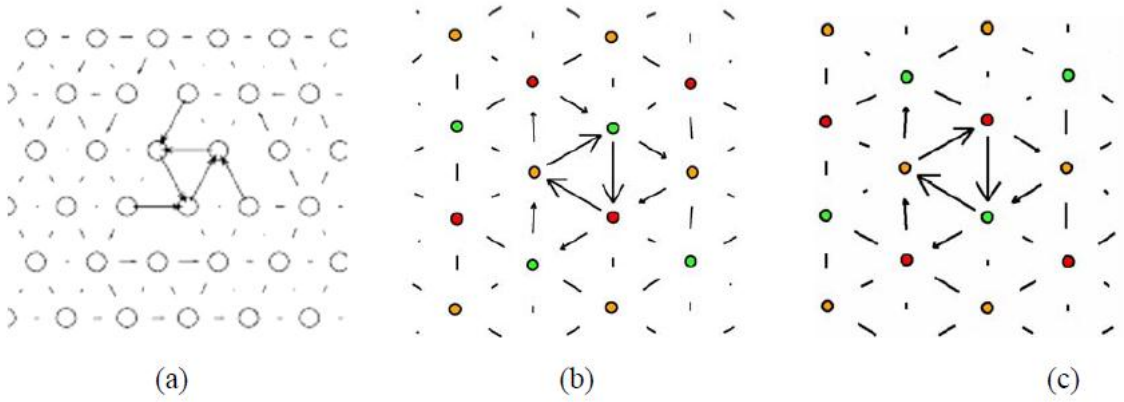


Figure 1.23 Structure du cœur d'une dislocation vis obtenue par (a) DM utilisant le potentiel de Simonelli *et al.* [Chaussidon *et al.*2006] ; (b) DM utilisant le potentiel de Mendelev et al. [Domain *et al.*2005] et (c) ab initio [Domain *et al.*2005]. Représentation de Vitek: les colonnes d'atomes sont indiquées par des cercles et les flèches symbolisent le déplacement relatif des atomes.

Les travaux de Chaussidon *et al.* [Chaussidon *et al.* 2006] ont permis d'éclairer le rôle de la structure de cœur sur le glissement dévié en mettant en avant l'importance de l'orientation du plan de cission résolue maximale (MRSSP en anglais) sur la capacité d'une dislocation vis à changer (ou non) de plan de glissement. Pour une structure de cœur dégénérée, les plans de glissement moyens observés sont de type {112}.

Il y a peu d'information sur les conditions d'activation du GD dans le régime thermiquement activé pour le fer. A haute température, certaines auteurs [Franciosi 1983, Taoka *et al.*1964] trouvent que celui-ci apparait tout au début de la déformation. Dans le régime athermique, les influences du GD sur les mécanismes de la forêt et d'Orowan sont étudiées par S. Queyreau [Queyreau 2008] à l'aide des simulations de dynamique des dislocations en prenant l'hypothèse qu'une dislocation change de plan de glissement si la contrainte effective dans ce plan est supérieure à celle dans le plan initial. Il montre que le GD peut induire un durcissement quand la déformation est petite mais donnera comme attendu un adoucissement à plus forte déformation.

Pour des raisons de simplicité, le glissement dévié des dislocations vis n'a pas été pris en compte dans notre modèle actuel. Cette simplification est bien sûr un des points importants à améliorer dans notre modèle pour les études à venir.

1.3.6 L'état de la microstructure

Le comportement plastique du fer monocristallin dépend aussi de l'état de la microstructure et surtout de la densité de dislocations. Schäublin et Karlik ont estimé que la densité de dislocations initiale dans une latte de ferrite était très grande et de l'ordre de 10^{14} m^{-2} [Schäublin *et al.* 1988][Karlik 2002]. Cette importante densité de dislocations est montrée sur la

Figure 1.24:

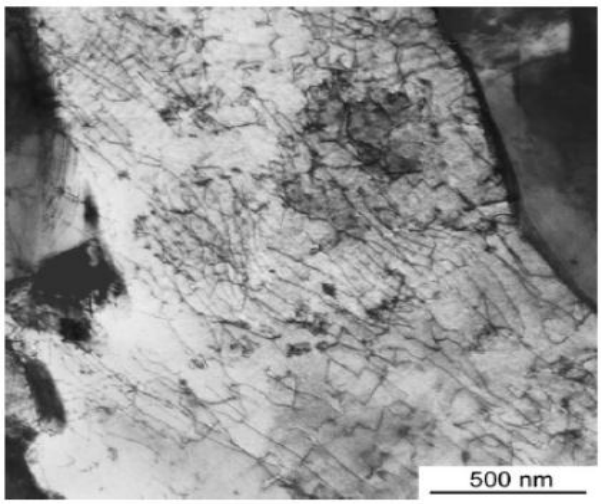


Figure 1.24 Microstructures de dislocations observées à l'intérieur d'une latte au MET en T=300K [Karlik *et al.* 2003]

Dans la thèse de Queyreau [Queyreau 2008], une densité de dislocations initiale d'environ 10^{13} m^{-2} pour chaque système de glissement a été choisie dans ses simulations. Nous utiliserons une valeur de 10^{14} m^{-2} comme densité initiale de dislocations pour les simulations massives présentées au chapitre 4.

1.3.7 Bilan sur le comportement mécanique du fer monocristallin non irradié

Nous avons présenté le comportement plastique des monocristaux de fer à l'état non irradié. Les mécanismes spécifiques de glissement cristallin ont tout d'abord été évoqués avant d'introduire la dépendance du comportement à la température et à la vitesse de déformation. Le glissement dévié est également présenté en fin de cette partie dédiée au comportement du monocristal de fer. Les mécanismes de durcissement ont été étudiés avec des simulations de DD par Queyreau [Queyreau 2008] dans le régime athermique et aussi par Nammane [Naamane 2008] dans le régime thermique. Ces auteurs ont étudié les durcissements associés aux carbures et aux interactions entre dislocations pendant leurs glissements. De plus, Queyreau a aussi étudié les effets de glissement dévié et des cavités qui sont un des défauts d'irradiation potentiellement responsables du durcissement du matériau.

Dans le paragraphe suivant, nous allons justement nous consacrer aux effets des défauts d'irradiation et plus particulièrement à ceux des boucles de dislocation sur le comportement mécanique, ce qui est le principal objectif de cette thèse.

1.4 Les défauts d'irradiations

Les défauts induits par l'irradiation de la cuve des réacteurs nucléaires résultent des interactions entre les neutrons émis par les réactions nucléaires au sein du matériau combustible et les atomes du métal. Suite à ces réactions, des déplacements d'atomes peuvent apparaître dans l'acier en créant une paire de défauts ponctuels : une lacune et un auto-interstitiel (en anglais : SIA Self-Interstitial Atom). Si les atomes primaires sont encore assez énergétiques, ils vont continuer à se déplacer et vont avoir des collisions avec d'autres atomes créant ainsi une cascade de déplacements atomiques. Les défauts ponctuels ainsi créés peuvent évoluer par migration dans une gamme de température moyenne au cœur d'un réacteur nucléaire ($0.2T_{fusion}<T<0.5T_{fusion}$). Dans ces gammes de températures on observe des recombinaisons, des annihilations ou aussi des agglomérations de défauts ponctuels afin de former des défauts plans ou volumiques en fonction de l'influence de la température, du flux etc. [Barbu *et al.* 2008]. La Figure 1.25 nous montre la formation de défauts d'irradiation à une dose de $3{,}75.10^{-1}$dpa. Ici le 'dpa' est le déplacement par atome (dpa) proposé par Norget, Robinson and Torrens (NRT) [Norgett *et al.* 1975] pour décrire le niveau de dommage dû à l'irradiation.

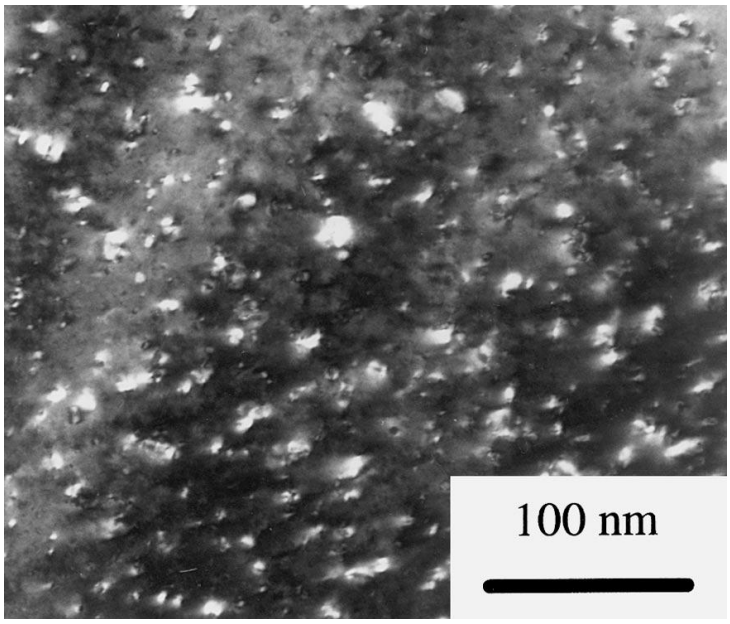


Figure 1.25 Défauts d'irradiation observés dans le fer pur irradié à 320 K à une dose de $3{,}75.10^{-1}$dpa. La taille des défauts est d'environ 5 nm [Singh *et al.* 1999].

Les deux graphiques de la Figure 1.26 ci-dessous montrent que l'irradiation induit un durcissement par une augmentation de la limite d'élasticité et aussi une diminution de la ductilité du matériau.

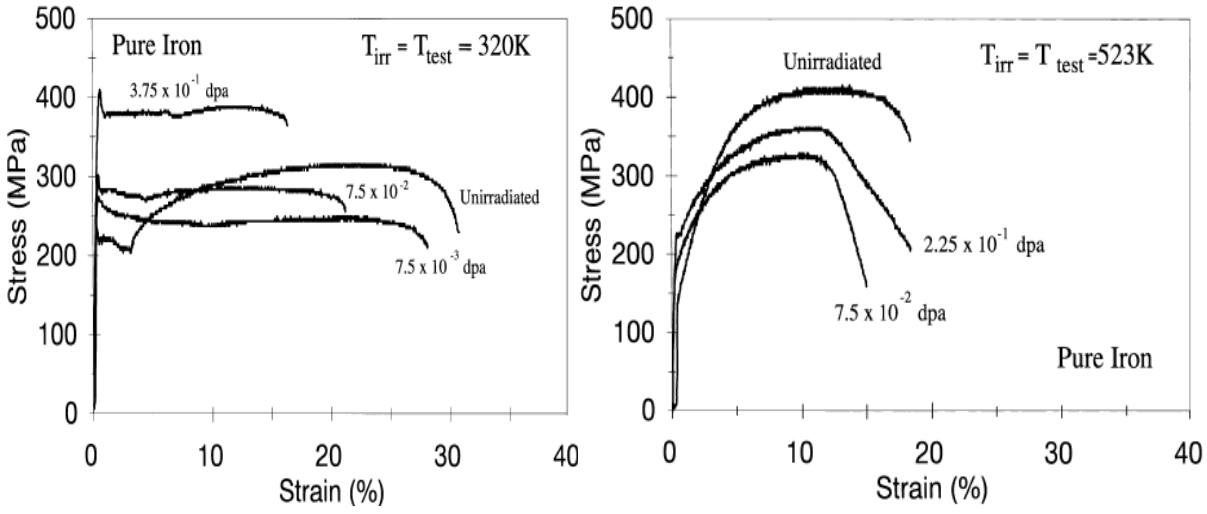


Figure 1.26 Courbes de traction conventionnelles sur fer pur aux températures 320K et 523K avec une vitesse de déformation de $1{,}3.10^{-3}s^{-1}$ [Singh *et al.*1999].

A l'échelle de la plasticité cristalline, ce sont les interactions entre les dislocations et les défauts d'irradiation qu'il convient de modéliser pour rendre compte du durcissement d'irradiation. Selon différents

résultats reportés dans la littérature (Figure 1.27), les défauts d'irradiation observés dans le fer pur sont essentiellement des cavités et des boucles de dislocation.

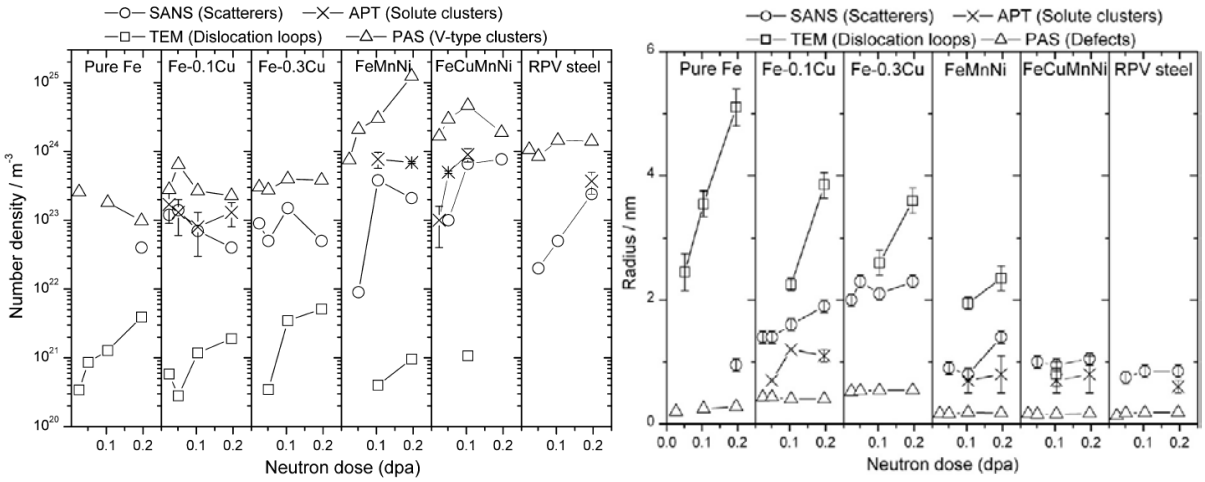


Figure 1.27 Evolution en fonction de la dose de la densité en nombre et de la taille des défauts d'irradiation observés dans différents matériaux modèles et un acier de cuve [Meslin-Chiffon *et al.* 2010].

1.4.1 Les cavités

Les cavités sont constituées de lacunes produites par l'irradiation [Eldrup *et al.* 2002, Zinkle *et al.* 2006, Stoller *et al.* 1997]. Après une fluence de 10^{19}n.cm^{-2} à une température de 560K, Odette *et al.* [1997] ont observé que ces défauts de morphologie sphérique avaient un rayon d'environ 0.5 nm et une densité en nombre de quelques 10^{24}m^{-3}.

Les simulations en Statique Moléculaire réalisées par Osetsky *et al.* [2003a] montrent que les diamètres *D* et les distances *L* entre obstacles ont une influence sur la contrainte nécessaire au franchissement de ces obstacles par une dislocation infinie (Figure 1.28).

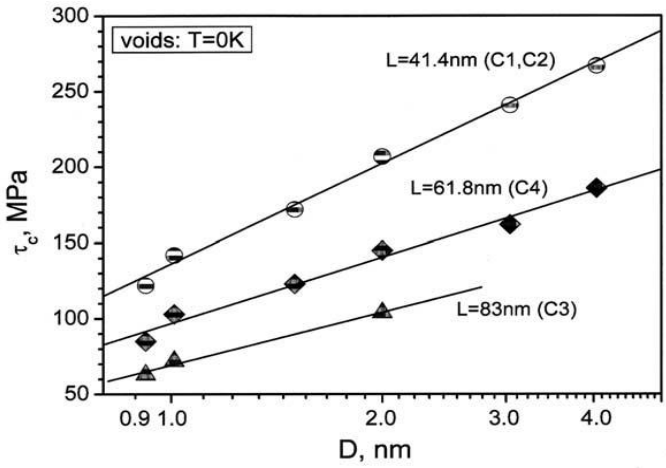


Figure 1.28 Influence de la distance entre obstacles et du diamètre des obstacles sur la cission critique à appliquer pour faire glisser une dislocation (Statique Moléculaire)

Plus récemment, le durcissement induit par des cavités a été étudié par Queyreau [Queyreau 2008] en dynamique des dislocations (DD). Il montre que les cavités sont responsables d'une hausse d'environ 20% de la contrainte d'écoulement de la ferrite à l'état irradié. Les conditions d'irradiation sont celles d'un réacteur expérimental belge (BR2), avec un flux de $1{,}4.10^{-7}$dpa*s^{-1}. La dose atteinte est de 0,19 dpa à une température de 288 K, ce qui conduit à une densité totale de cavités de $2{,}1.10^{23}$ m^{-3}, pour un diamètre moyen de l'ordre de 2 nm.

Enfin, des simulations en Dynamique Moléculaire [Terentyev *et al.* 2008a] ont été réalisées pour étudier les effets de tailles des cavités et de la température (Figure 1.29). L'influence du potentiel empirique choisi pour effectuer ces simulations (P04 proposé dans [Ackland *et al.* 2004] pour cet article contre P97 proposé par [Ackland *et al.* 1997] dans les résultats publiés par [Bacon *et al.* 2003, Osetsky *et al* 2003a]) a également été évaluée.

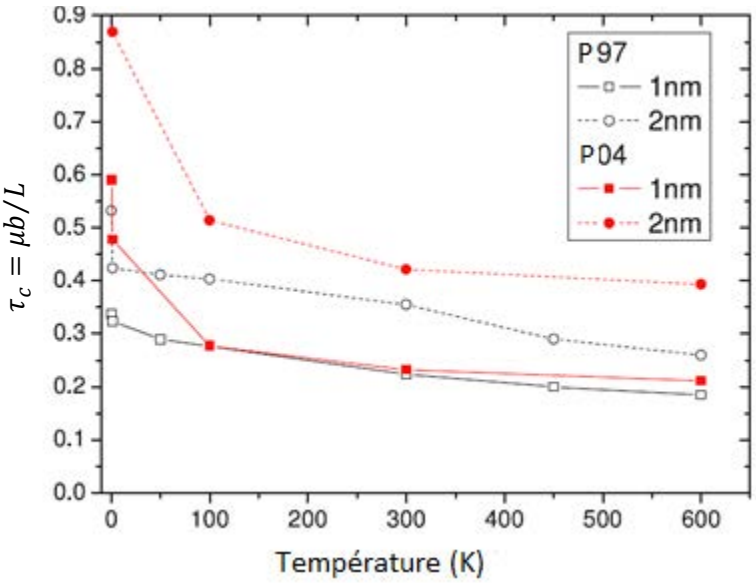


Figure 1.29 Effets des diamètres des cavités et de la température sur la contrainte critique pour une dislocation coin avec L+D=41nm (L est la longueur de la distance entre les cavités, D est le diamètre de la cavité). τ_c est en unité de $\mu b/L$: G est le module de cisaillement et b est le module de son vecteur de Burgers

1.4.2 Les boucles de dislocation

Zinkle *et al.* [Zinkle *et al.* 2006] montrent que la plupart des boucles de dislocation observées (80%) en MET (Microscopie Electronique en Transmission) dans les matériaux CC irradiés à la température de 340K sont de nature interstitielle et situées dans les plans cristallographique {111} et avec un vecteur de Burgers $\boldsymbol{b}_L$ = 1/2<111>. Ce type de boucle correspond est également, à cette température et en dynamique moléculaire, la configuration d'énergie minimale [Bacon *et al.* 2003]. Les simulations en Statique Moléculaire montrent que la forme la plus stable des boucles est la forme hexagonale avec les segments suivant les directions <112>. Avec le même vecteur de Burgers, il existe également environ 15% de boucles qui se situent dans les plans {110} [Zinkle *et al.* 2006].

[Zinkle *et al.* 2006, Nicol *et al.* 2001, Robertson *et al.* 1982, Horton *et al.* 1982] ont montré qu'il existe un autre type de boucles de dislocation situées dans des plans {100}, avec $\boldsymbol{b}_L$ = <100>, de forme carrée et

avec des segments dans les directions <110> ou <100>. La fraction de ce type de boucles augmente avec la température d'irradiation. Les calculs récents indiquent que ce dernier type de boucles est plus favorable à haute température [Dudarev *et al.* 2008]. A 520K, la plupart des boucles sont de type <100> alors qu'on n'en trouve moins de 1% quand la température d'irradiation est de 340K.

Dans les métaux de structure CC et en l'absence d'impureté, toutes les boucles de dislocation sont des boucles parfaites qui sont mobiles suivant leur vecteur de Burgers. Pour les petites boucles contenant moins de 100 SIAs, le vecteur de Burgers $\boldsymbol{b}_L$ peut changer de direction à l'aide de l'activation thermique à haute température. Cela n'est plus possible pour les grandes boucles [Osetsky *et al.* 2003b, Arakawa *et al.* 2006].

La Figure 1.30 ci-dessous nous montre d'une part qu'il n'y a pas de défaut observé quand la dose d'irradiation est de 0.0001 dpa (la limite de résolution est environ 0.5 nm) et d'autre part que la densité de boucles augmente quand la dose augmente.

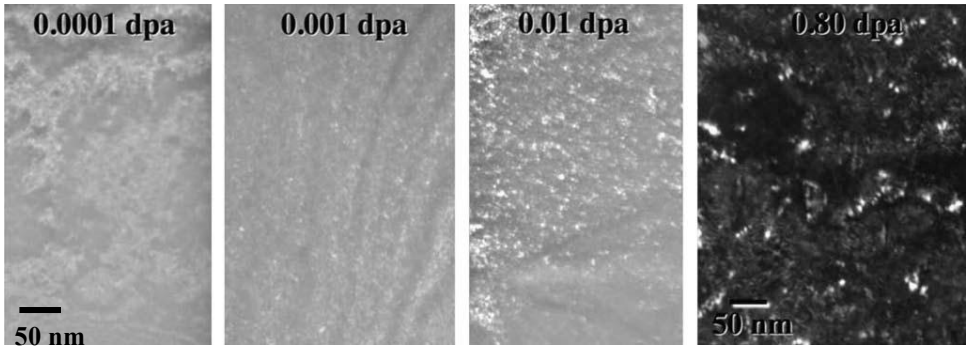


Figure 1.30 Les défauts d'irradiation dans le fer pur pour différentes doses [Zinkle *et al.* 2006]

Plus précisément, [Zinkle *et al.* 2006] ont aussi obtenu l'évolution des densités des boucles de dislocation et de leur taille moyenne en fonction de la dose (Figure 1.31).

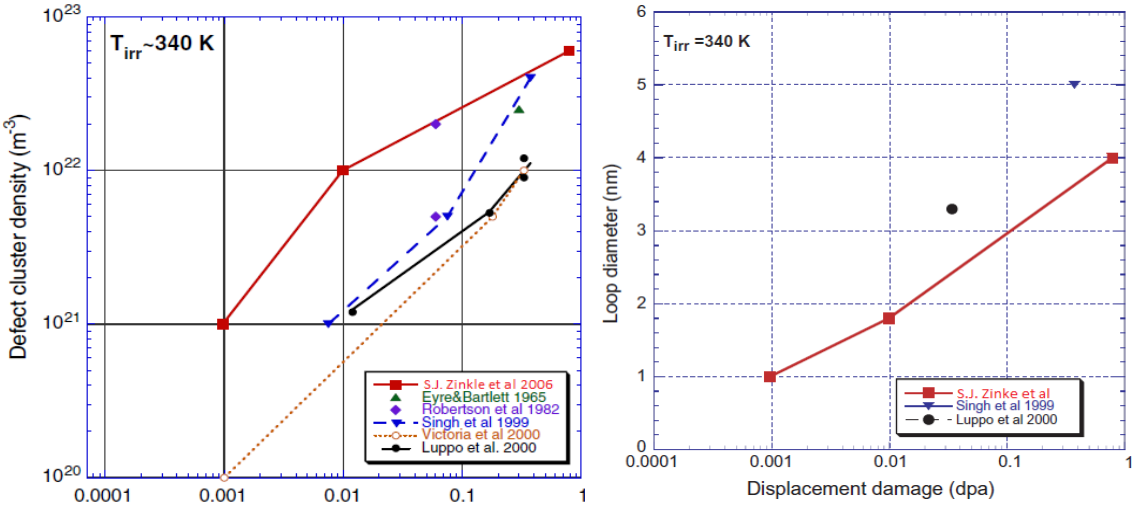


Figure 1.31 Densités et tailles des boucles de dislocation observées en fonction de la dose [Zinkle *et al.* 2006]

On définit les interactions entre une dislocation et une boucle de dislocation suivant deux types : l'interaction élastique (l'interaction à longue distance) et l'interaction de contact (l'interaction à courte distance) [Jumel *et al.* 2005].

Les interactions élastiques entre une dislocation et une boucle peuvent être calculées par la théorie élastique isotrope [Kroupa 1962, Makin 1964, Rhee *et al.* 1998] avant l'entrée en contact des deux défauts. Dès que le contact est effectif, une réaction se forme et celle-ci peut bloquer le glissement de la dislocation. En première approximation la force de blocage des réactions de contact est estimée à $F_{max} \approx \frac{\mu b^2}{4}$ par Friedel [Friedel 1964] et à $F_{max} \approx \frac{\mu b^2}{48}$ par Kimura et Maddin [Kimura *et al.* 1969]. Ici μ est le module de cisaillement et b est le module de son vecteur de Burgers.

D'après les résultats de simulations faites en DM, les interactions entre une dislocation et une boucle ne dépendent pas seulement du caractère coin ou vis des dislocations, mais aussi du type des boucles, de la taille des boucles et de la vitesse de déformation appliquée. Bien qu'il existe de nombreux cas différents, on peut classifier les principales réactions de la façon suivante [Bacon *et al.* 2009].

1.4.2.1 *Réaction R_1 : La dislocation et la boucle restent inchangées après le passage de la dislocation.*

L'obstacle est cisaillé par la dislocation et garde la même forme après le passage de la dislocation. Cette réaction est souvent observée avec les SFTs (Stacking Fault Tetahedra) et les boucles de Frank dans les matériaux cubiques à face centrée (Anglais : Face Centered Cubic : FCC) mais aussi dans les CC comme sur la Figure 1.32 entre une dislocation coin et une grande boucle de dislocation.

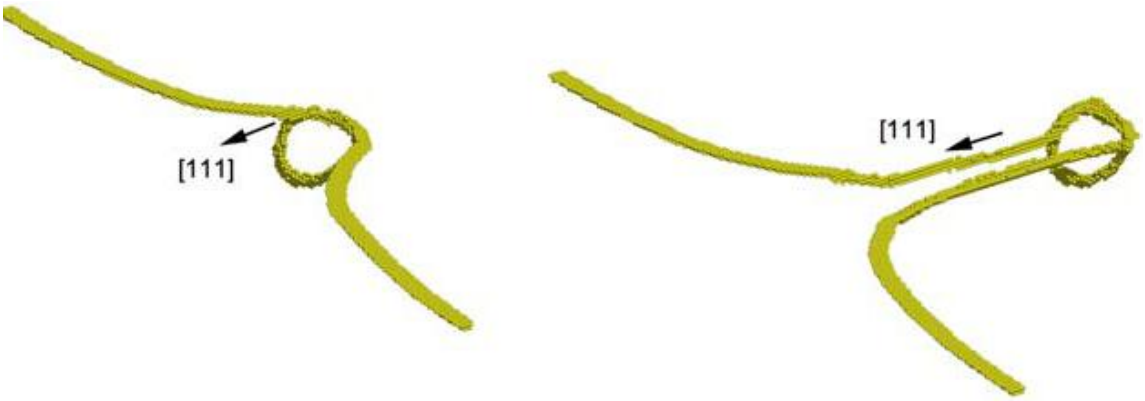


Figure 1.32 Visualisation des interactions entre une dislocation coin et une boucle de 331-SIA dans le fer à T =100K et $\dot{\varepsilon}$=5.10^6 s^{-1}. [Bacon *et al.* 2006]

Cette réaction a aussi été observée entre une dislocation vis et une boucle de vecteur de Burgers b=<100> [Terentyev *et al.* 2009]. Les auteurs ont trouvé que la boucle n'était ni absorbée ni transformée [Figure 1.33].

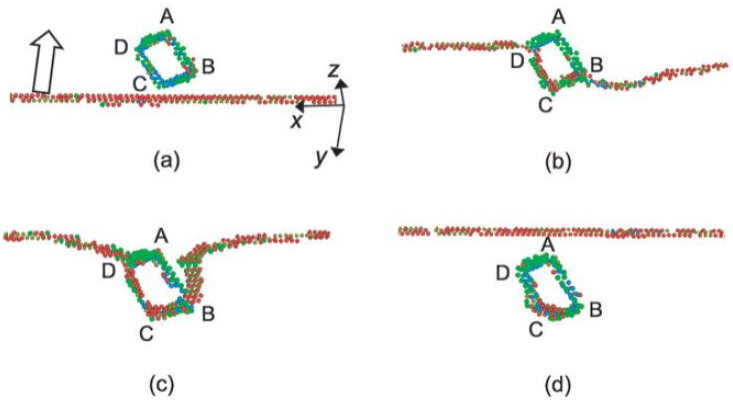


Figure 1.33 Visualisation des interactions entre une dislocation vis et une boucle de 128-SIA dans le fer à T =300K et $\dot{\varepsilon}=10^7$ s^{-1}. [Terentyev *et al.* 2009]

1.4.2.2 *Réaction R_2 : L'obstacle est traversé et changé mais pas la dislocation.*

Dans les matériaux CC, le changement d'une boucle de b_L<100> en une boucle de type mixte <100>/ ½<111> est observé après le passage d'une dislocation coin (Figure 1.34).

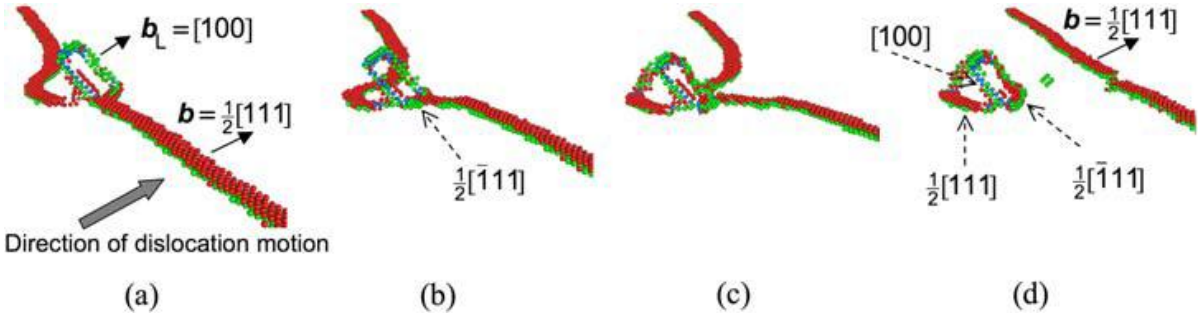


Figure 1.34 Visualisation des interactions entre une dislocation coin ½[111] (1-10) et une boucle [100] dans le fer à T =300K. [Terentyev *et al.* 2008b]

Terentyev *et al.* [2009] ont aussi trouvé une réaction similaire entre une dislocation vis et une boucle de type <100> : au lieu d'induire un tour d'hélice, la boucle finit par s'échapper en laissant derrière un défaut complexe sessile en forme de double boucle :

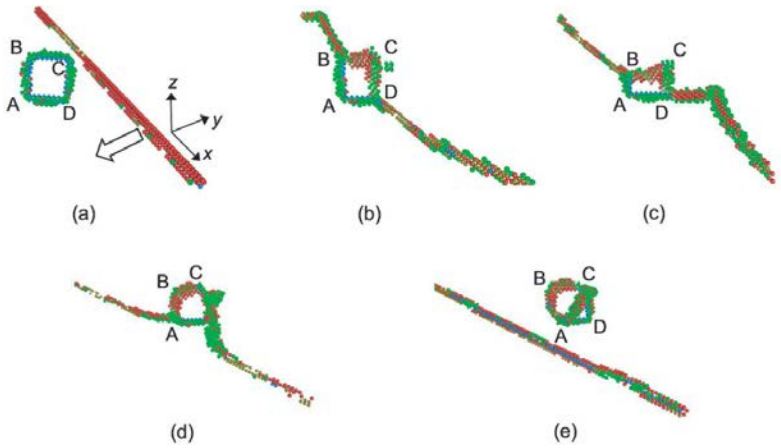


Figure 1.35 Visualisation des interactions entre une dislocation vis de ½[111] (1-10) et une boucle [100] dans le fer à T =100K. [Terentyev *et al.* 2009]

Enfin, Liu *et al.* [2008] ont montré que les grandes boucles (>127 SIA) de type ½ [1-11] peuvent interagir en formant un segment <100> en commun avec une dislocation vis. Celle-ci s'échappe ensuite en laissant derrière elle une boucle <100> (Figure 1.36).

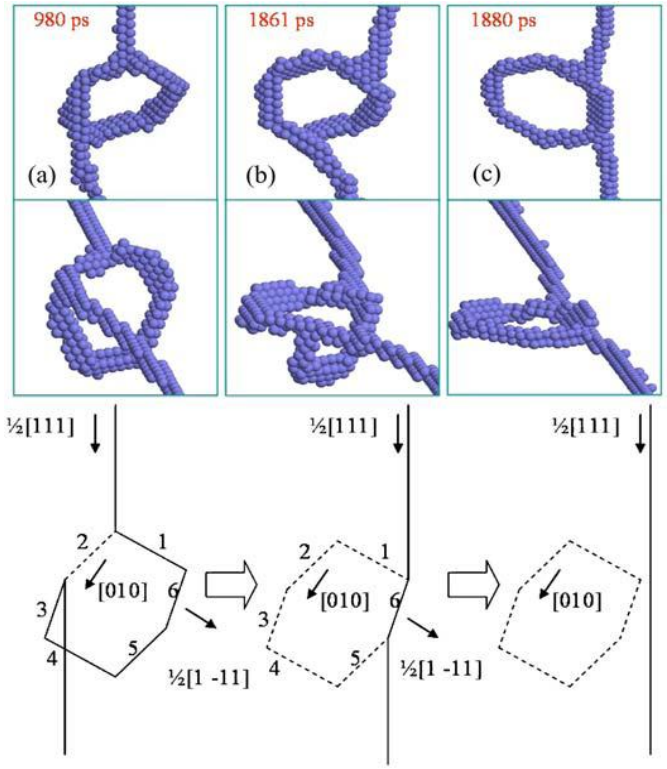


Figure 1.36 Visualisation des glissements et des transformations d'une boucle de 127-SIA avec une dislocation vis dans le fer à T = 100K. [Liu *et al.* 2008]

1.4.2.3 *Réaction R_3 : Absorption et transport par la dislocation*

Ce mécanisme est observé dans les CC entre une dislocation coin et des petites boucles de dislocation. Les petites boucles ayant un vecteur de Burgers b_L orienté vers le plan de glissement de la dislocation vont être attirées par la dislocation puis vont être absorbées par elle (Figure 1.37).

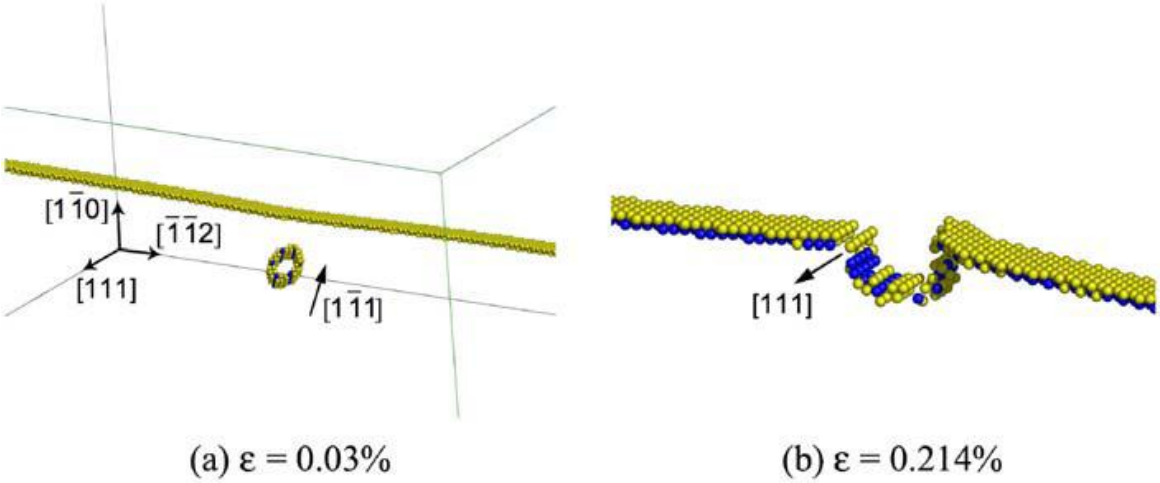


Figure 1.37 Visualisation du glissement et de l'absorption d'une boucle de 37-SIA par une dislocation coin dans le fer à T = 0K. [Bacon *et al.* 2006]

Les grandes boucles de dislocation vont tout d'abord former un segment commun avec la dislocation et vont changer leur propre b_L pour prendre celui de la dislocation à l'aide d'une grande contrainte appliquée et de l'activation thermique (Figure 1.38).

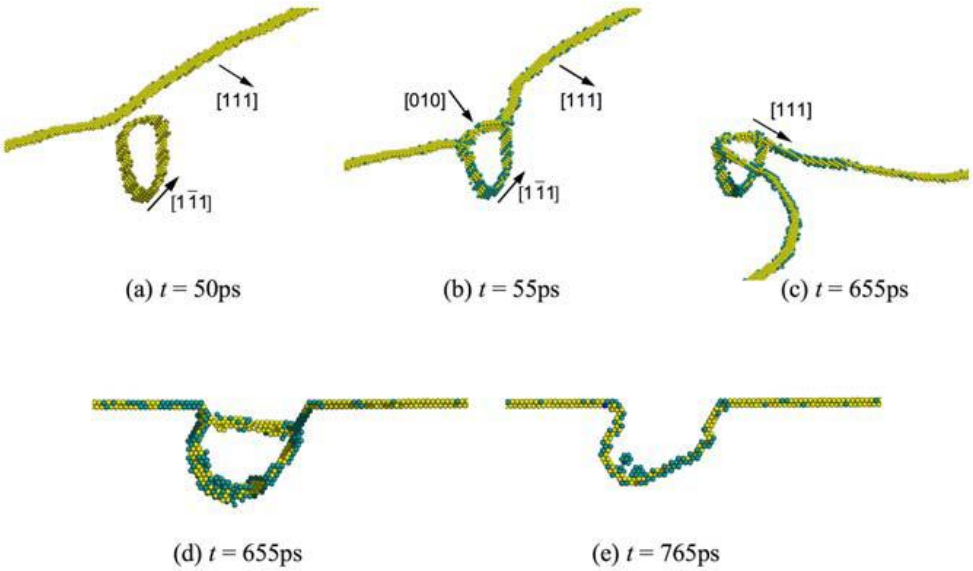


Figure 1.38 Visualisation du glissement et de l'absorption d'une boucle de 331-SIA avec une dislocation coin dans le fer à T = 300K. [Bacon *et al.* 2006]

1.4.2.4 *Réaction R_{3drag} : L'obstacle est trainé par la dislocation et tous les deux restent inchangés.*

Dans les matériaux CC, ce mécanisme apparait quand une boucle a son vecteur de Burgers parallèle au plan de glissement de la dislocation coin et qu'il n'y a pas d'intersection entre eux (ou que la boucle n'est pas trop petite et trop proche du plan de glissement de la dislocation auquel cas, la boucle pourrait être absorbée selon le type de réaction R_3 vu précédemment).

La boucle a la possibilité de bouger parce qu'elle est sous une contrainte de compression au-dessus du plan de glissement de la dislocation et sous une contrainte de traction au-dessous du plan. Ce résultat a été justifié dans le cadre de la théorie élastique par [Makin 1964, Kubin *et al.* 2000]. Les simulations faites en DM de [Rong *et al.* 2005] montrent aussi que la boucle va être décrochée et laissée sur place si la contrainte appliquée est supérieure à une valeur critique (vitesse trop importante de la dislocation).

1.4.2.5 *Réaction R_4 : Absorption partielle ou entière par la dislocation en formant un tour d'hélice.*

Cette réaction est statistiquement la plus commune entre une dislocation vis et une boucle dans les matériaux CC. La dislocation va absorber en partie ou intégralement la boucle afin de former un tour d'hélice (Figure 1.39).

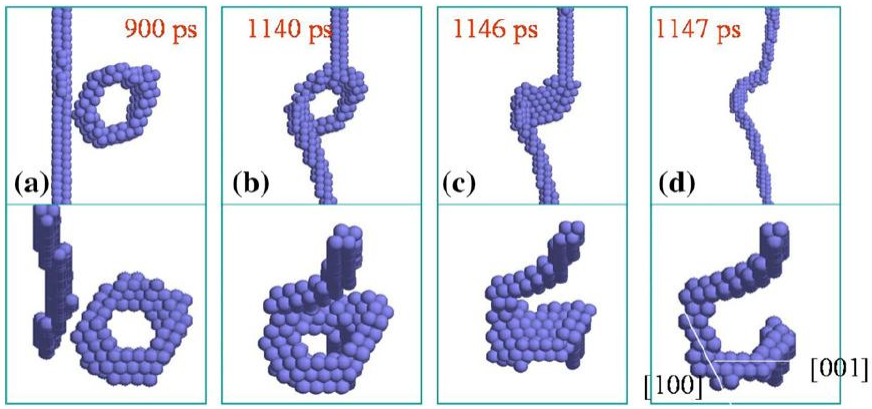


Figure 1.39 Visualisation des absorptions d'une boucle de 37-SIA de vecteur de Burgers **b**=½[1-11] avec une dislocation vis dans le fer (R_4). [Liu *et al.* 2008]

Les tours d'hélice sont des obstacles au glissement de la dislocation car ils ne peuvent bouger que dans la direction de leur vecteur de Burgers. Ils constituent un ancrage très fort car le tour est étendu le long des lignes de dislocations vis.

Le désancrage de la dislocation vis se fait en laissant une boucle de même vecteur de Burgers que la dislocation à l'arrière de la dislocation mobile et en détruisant le tour d'hélice le long de celle-ci (Voir Figure 1.40)

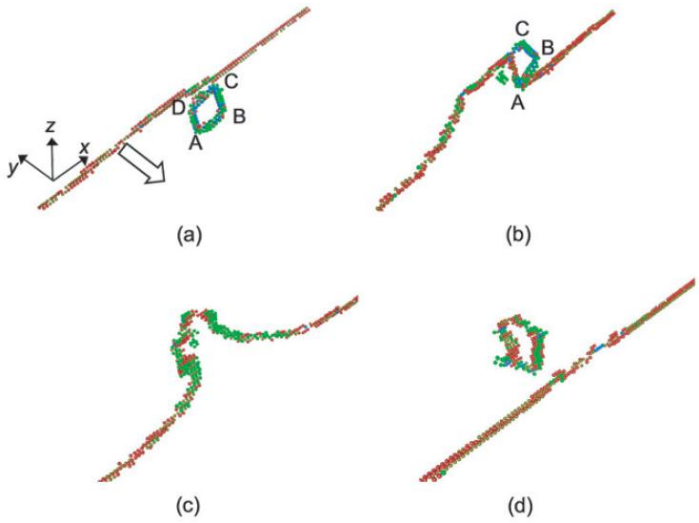


Figure 1.40 Visualisation des interactions entre une dislocation vis de ½[111] (1-10) et une boucle [010] dans le fer à T =300K. [Terentyev *et al.* 2009]

Enfin, il est intéressant de noter que les réactions R_3, R_{3drag} et R_4 sont certainement les principaux mécanismes intervenant dans le mécanisme de formation des bandes claires dans des matériaux irradiés. Les figures ci-dessous nous résument les différentes prédictions par les simulations atomiques de forces d'ancrage qui existent entre une dislocation coin et les différents types de boucles d'autre part [Terentyev *et al.* 2008b, Bacon *et al.* 2006] (Figure 1.41 à gauche). Sur la même figure on donne l'évolution en fonction de la température de la force d'obstacle et du type de réactions entre une dislocation vis et différente types de boucles [Terentyev *et al.* 2009, Liu *et al.* 2008] (Figure 1.41 à droite):

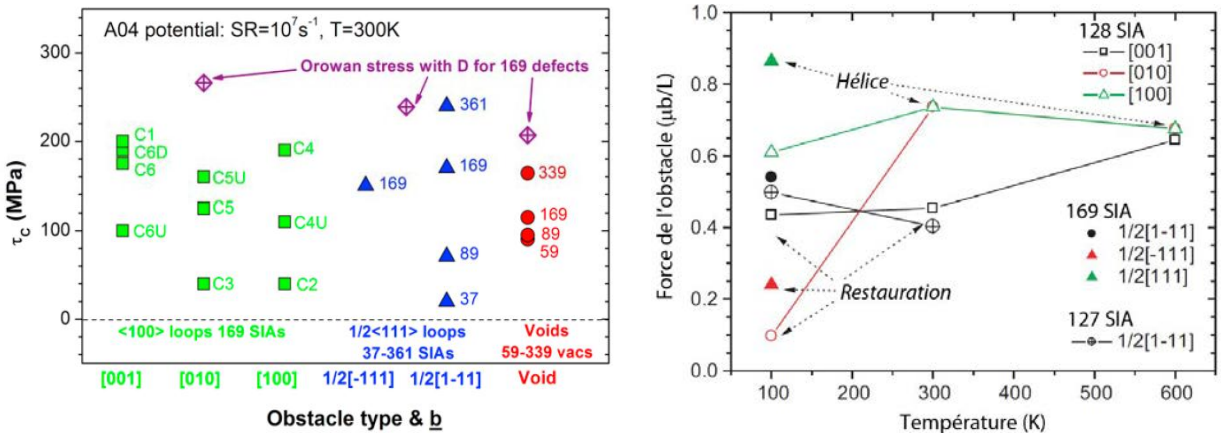


Figure 1.41 Force d'ancrage obtenue en DM pour (Figure à Gauche) : une dislocation coin et les différents obstacles (boucles avec **b**=<100>, avec **b**=½<111> et cavités nanométriques) [Terentyev *et al.* 2008b, Bacon *et al.* 2006] ; (Figure à Droite) : une dislocation vis et les différents types de boucles en fonction de la température. [Terentyev *et al.* 2009, Liu *et al.* 2008]

1.4.3 Les amas d'élément d'alliage

Dans une centrale nucléaire, après une durée de fonctionnement d'environs 40 ans, les aciers de cuve peuvent avoir subi une fluence de $6{,}5.10^{19}$ neutrons/cm², soit une dose d'environ 0,1 dpa. On constate qu'il existe dans l'acier de cuve irradié d'autres types de défauts d'irradiation que ceux rencontrés dans le Fer pur : les amas d'éléments d'alliage et les précipités sphériques. Ainsi des résultats expérimentaux montrent que les boucles de dislocation et les cavités (défauts matriciels) n'ont pas été observées même après une dose de 0,2 dpa dans l'acier de cuve [Meslin *et al.* 2010]. Ceci étant, il est probable qu'une corrélation existe entre les défauts matriciels (de trop petite taille pour être détectés par les moyens d'observation) et les défauts de solutés dans l'acier de cuve irradié.

Le rayon des amas d'éléments d'alliage observés par [Odette *et al* 1997] dans un acier de cuve irradié à 560K avec une fluence neutronique de 10^{19}n cm^{-2} est inférieur à 1.5 nm avec une densité d'environ 10^{24} m^{-3}. Les défauts sont constitués de Cu, Mn, Ni, Si et aussi d'une grande concentration en fer (environ 85%), ce qui va diluer les amas [Jumel *et al.* 2005].

Des études ont déjà été faites sur les interactions de ces défauts avec des dislocations. En général, ces défauts vont épingler les dislocations et augmenter les forces d'obstacles qu'il faut dépasser pour faire bouger les dislocations [Terentyev *et al* 2011]. Ceci étant, il n'existe pas encore de modèle qui puisse décrire les effets des amas d'élément d'alliage. [Meslin-Chiffon 2007] observe que les dislocations sont « décorées » par ces amas.

1.4.4 Les précipités de Cuivre

Ces défauts sont des regroupements d'atomes de cuivre. Ils ont un rayon moyen de 1.5 nm et une densité de $10^{24}m^{-3}$ dans les conditions d'irradiation suivantes : température de 560K et fluence neutronique 10^{19}n cm^{-2} [Odette *et al* 1997]. Au sein des défauts, il existe d'autres éléments d'alliage comme Mn, Ni, Si et aussi Fe mais le travail de Buswell *et al.* [Buswell *et al.* 1995] montre que les précipités sont pratiquement purs. La Figure 1.42 ci-dessous nous donne un aperçu de la morphologie de ces défauts dans l'acier par sonde atomique [Pareige 1994] :

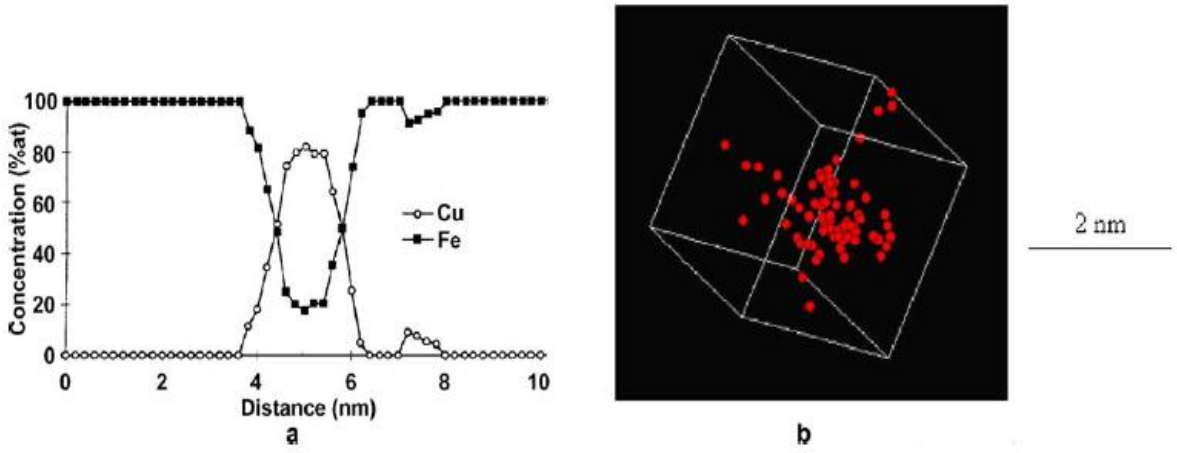


Figure 1.42 (a) Concentration en Fer et Cuivre dans un précipité de cuivre (b) Les amas de Cu observés dans le Fe-0.1%Cu irradié à la température 560K par sonde atomique [Pareige 1994]

On peut imaginer que pour le type de défaut analysé sur la Figure 1.42 est fait d'une zone de cœur d'environ 1 nm avec une densité de 80% de cuivre et 20% de fer. Harry et Bacon [Harry *et al* 2002] trouvent par simulations en DM qu'une transition de structure CC vers FCC s'opère pour ces précipités. Ils ont aussi trouvé que plus la taille du précipité est grande, plus la portion du précipité transformée en FCC est grande.

1.4.5 Bilan sur les défauts d'irradiation

Nous avons vu dans les parties précédentes que de nombreux défauts d'irradiation pouvaient être créés : cavités, boucles de dislocation, amas d'éléments d'alliage, précipités. Pour détecter chaque type de défaut et mesurer leur densité et/ou leur taille, une technique expérimentale spécifique doit être choisie : d'après l'article [Lambrecht *et al.* 2010], la technique 'PAS' (Positron Annihilation Spectroscopy) ne détecte que les cavités de petite taille tandis que l''APT' (Atom-Probe Tomography) et le 'SANS' (Small Angle Neutron Scattering) détectent plutôt les précipités. Les mesures obtenues avec ces deux dernières techniques sur différents matériaux modèles retenus dans le projet PERFECT [Lambrecht *et al.* 2010] sont par ailleurs très proches (Figure 1.43a), ce qui confère un haut niveau de confiance dans ces résultats de mesure. Enfin, les observations en 'TEM' (Transmission Electron Microscope) permettent principalement de détecter les boucles de dislocation qui ont une taille supérieure à 2 nm.

Selon le type de matériau irradié, la température et la fluence, la nature, les tailles et les densités des défauts sont différentes tout comme les niveaux de contraintes à dépasser pour franchir ces obstacles. La Figure 1.43 nous montre comment évoluent ces quantités pour différents matériaux modèles.

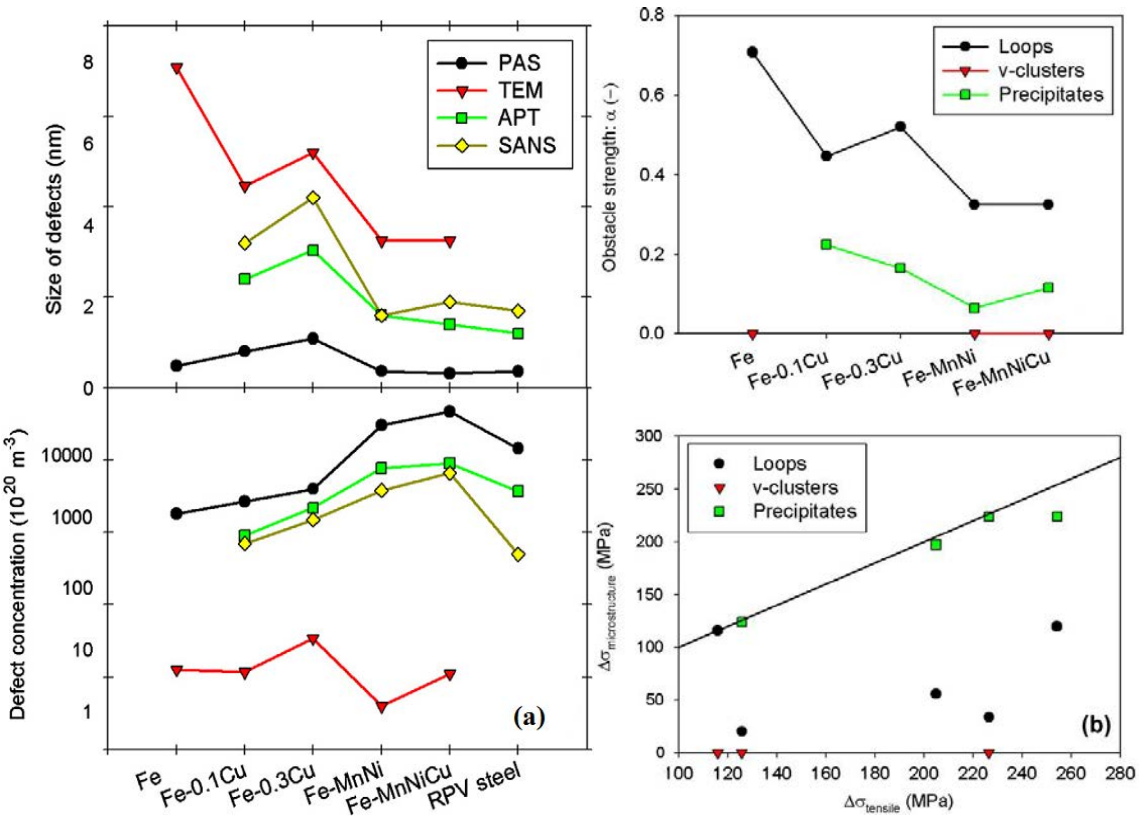


Figure 1.43 (a) Les tailles et les densités des défauts d'irradiation dans les différents matériaux irradiés jusqu'à 0.1 dpa à la température 573K (b) Estimation des forces d'obstacle et de leur contribution au durcissement d'irradiation [Lambrecht *et al.* 2010]

Conclusion

Les observations expérimentales ont mis en évidence certains effets des défauts d'irradiation sur le comportement mécanique du matériau comme le durcissement. Alors qu'il existe plusieurs types de défauts dans les matériaux après irradiation, nous avons choisi pour notre étude de nous concentrer sur les effets des boucles de dislocation dans le fer pur uniquement. L'étude de ces interactions est un cas modèle et bien documenté par les simulations atomiques. Par ailleurs, pour simplifier encore la problématique, toutes nos simulations concerneront le domaine athermique pour lequel notre analyse de la littérature nous conduit à considérer que la température avait peu d'effet sur le comportement.

Bibliographie

[Ackland *et al.* 1997] G.J. Ackland, D.J. Bacon, A.F. Calder, T. Harry, Phil Mag A 75.3 (1997) 713

[Ackland *et al.* 2004] G.J. Ackland, M.I. Mendelev, D.J. Srolovitz, S. Han, A.V. Barashev, J Phys: Condens Matter 16.27 (2004): S2629

[Arakawa *et al.* 2006] K. Arakawa, K. Ono, M. Isshiki, K.Mimura, M. Uchikoshi, H. Mori, Science 318 (2007) 956

[Bacon *et al.* 2003] D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, Mater. Sci. Eng. A 400/401 (2003) 353

[Bacon *et al.* 2009] D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, Mathematics and Mechanics of Solids 14 (2009) 270-283

[Barbu *et al.* 2008] A. Barbu, Jean-Paul MASSOUD, Techniques de l'ingénieur BN3760

[Bhadeshia *et al.*1990] H. K. D. H. Bhadeshia, J. W. Christian, Metall. Trans. A 21 (1990) 767

[Bhadeshia 2000] H. K. D. H. Bhadeshiadans ''Bainite in steel'', IOM communications ltd. (2001).

[Bilger 1966] H. Bilger, Phys. Stat. Sol. 18 (1966) 637

[Bouyne 1999] E. Bouyne, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris (1999)

[Buswell *et al.* 1995] J. T. Buswell, W. J. Phythian, R. J. McElroy, S. Dumbill, P. H. N. Ray, J. Mace, R. N. Sinclair, J. Nucl. Mater. 225 (1995) 196

[Carassou 2000] S. Carassou, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines deParis (2000).

[Chaussidon *et al.* 2006] J. Chaussidon, M. Fivel, D. Rodney, Acta Mater. 54 (2006) 3407

[Chaussidon 2007] J. Chaussidon, Thèse de doctorat de l'Institut National Polytechnique de Grenoble (2007).

[Diawara 2007] B. Diawara, Master Thesis, Université Louis Pasteur de Strasbourg – EDF (2007)

[Domain *et al.* 2005] C. Domain, G. Monnet, Phys. Rev. Lett.95 (2005) 215506

[Dudarev *et al.* 2008] S.L. Dudarev, R. Bullough, P.M. Derlet, Phys.Rev.Lett. 100 (2008) 135503

[Duesbery 1991] M.S. Duesbery, G.Y. Richardson, Solid State and Materials Sciences, 14 (1991) 46

[Eldrup *et al.* 2002] M. Eldrup, B.N. Singh, S.J. Zinkle, T.S. Byun, K. Farrell, J. Nucl. Mater. 307 (2002) 912

[Eyre *et al.* 2001] B.L. Eyre, A.F. Bartlett, Philos. Mag. 12 (1965) 261

[Franciosi 1983] P. Franciosi, Acta Metall. 31 (1983) 1331

[Friedel 1964] J. Friedel, Dislocations, Pergamon Press, (1964) 454

[Gourgues *et al.* 2000] A.F. Gourgues, H.M. Flower, T.C. Lindley, Materials Science and Technology, 16 (2000) 26

[Harry *et al.* 2002] T. Harry, D.J. Bacon, Acta Mater. 50 (2002) 195

[Haušild 2002] P. Haušild, Thèse de doctorat, Ecole Centrale Paris (2002)

[Honeycombe 1968] R.W.K. Honeycombe, The Plastic Deformation of Metals, EdwardArnold Ltd., London (1968)

[Horton *et al.* 1982] L.L.Horton, J.Bentley, K.Farrell, J.Nucl.Mater. 108 (1982) 222

[Hull *et al.* 2001] D. Hull, D.J. Bacon, Introduction to Dislocations, Butterworth-Heinemann Press (Fourth Edition 2001)

[Jumel *et al.* 2005] S. Jumel, J.C Van Duysen, J. Ruste, C.Domain, J.Nucl.Mater.346 (2005) 79

[Karlik 2002] M. Karlik, rapport de Czech Technical University in Prague V-KMAT-516/02 (2002)

[Karlik *et al.* 2003] M. Karlik, I. Nebdal, J. Siegl, Mat. Sci. Eng. A 357 (2003) 423

[Keh *et al.*1967] A. S. Keh, Y. Nakada, Can. J. Phys. 45 (1967) 1101

[Kimura *et al.* 1969] H. Kimura, R. Maddin, Lattice Defects in Quenched Metals, Academic Press, New York, (1969) 319

[Kroupa 1962] F. Kroupa, Philos. Mag. 7 (1962) 783

[Kubin *et al.* 2000] L.P. Kubin, J. Kratochvil, Philos. Mag. A 80 (2000) 201.

[Kuksin *et al.* 2013] A.Y. Kuksin, A.V. Yanilkin, Physics of the solid state, 55 (5) (2013) 1010

[Kumagai 1990] J. Kumagai, Mater. Sci. Eng, A 129 (1990) 207

[Kumagai *et al.* 1990] J. Kumagai, S. Takaki, S. Suzuki, H. Kimura, Mat. Trans. JIM 2 (1990) 118

[Lambrecht *et al.* 2010]M. Lambrecht, E. Meslin, L. Malerba, M. Hernandez-Mayoral, F. Bergner, P. Pareige, B. Radiguet, A. Almazouzi, J. Nucl. Mater. 406 (2010) 84

[Libert 2007] M. Libert, Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Paris (2007)

[Liu *et al.* 2008] X.Y. Liu, S.B. Biner, Scripta Mater. 59 (2008) 51

[Luppo *et al.* 2001] M.I. Luppo, C. Bailat, R. Schäublin, M. Victoria, J. Nucl. Mater. 283 (2000) 483

[Makin 1964] M. Makin, Philos. Mag. 10 (106) (1964) 695

[Martin 1990] I. Martin, Rapport de stage de l'Ecole Centrale Paris (1990).

[Mathieu 2006] J.P. Mathieu, Thèse de doctorat de l'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers (2006)

[Mc Cabe *et al*. 1998] D. E. Mc Cabe, J. G. Merkle, K. Wallin, Fatigue and Fracture Mechanics, 30th Volume, ed. A. S. 1360. Washington University, Saint Louis, Missouri.

[Meslin-Chiffon 2007] E. Meslin-Chiffon, Thèse de Doctorat de l'Université de Rouen (2007)

[Meslin *et al.* 2010] E. Meslin, M. Lambrecht, M. Hernandez-Mayoral, F. Bergner, L. Malerba, P. Pareige, B. Radiguet, A. Barbu, D. Gomez-Briceno, A.Ulbricht, A. Almazouzi, J. Nucl. Mater 406 (2010) 73

[Miloudi 1997] S. Miloudi, Thèse de doctorat de l'université d'Orsay (1997)

[Monnet *et al.* 2009] G. Monnet, D. Terentyev, Acta Materialia, 57 (2009) 1416

[Naamane 2008] S. Naamane, Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie (2008)

[Nicol *et al.* 2001] A.C. Nicol, M.L. Jenkins, M A. Kirk, MRS Symp Proc, 650 (2001)

[Norgett *et al.* 1975] M.J. Norgett, M.T. Robinson, I.M. Torrens, Nucl. Eng. Des. 33 (1975) 50

[Novaha *et al.* 2003] J. Nohava, P. Haušild, M. Karlik, P. Bompard , Materials Charact. 49 (2003) 211

[Odette *et al.* 1997] G.R. Odette, B.D. Wirth, J. Nucl. Mater. 251 (1997) 157

[Ohmori *et al.* 1991] Y. Ohmori, T. Maki, Mat. Trans. JIM 8 (1991) 631

[Ohmori 2002] Y. Ohmori, Scripta Mat. 47 (2002) 201

[Osetsky *et al.* 2003a] Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, J. Nucl. Mater. 323 (2003) 268

[Osetsky *et al.* 2003b] Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, A. Serra, B.N. Singh, S.I. Golubov, Philos. Mag. 83 (2003) 61

[Pareige 1994] P. Pareige, Thèse de doctorant, Université de Rouen (1994)

[Queyreau 2008] S. Queyreau, Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie (2008)

[Queyreau *et al.* 2011] S. Queyreau, J. Marian, M.R. Gilbert, B.D. Wirth, Physical Review B 84 (2011) 064106

[Raoul 1999] S. Raoul, Université Paris XI Orsay (1999)

[Renevey 1997] S. Renevey, Université Paris XI Orsay (1997)

[Rhee *et al.* 1998] M. Rhee, H.M. Zbib, J.P. Hirth, H. Huang, T. de la Rubia, Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. 6 (1998) 467

[Robertson *et al.* 1982] I.M. Robertson, M.L. Jenkins, C.A. English, J. Nucl. Mater. 108 (1982) 209

[Robertson *et al.* 2001] I.M. Robertson, M.L. Jenkins, C.A. English, J. Nucl. Mater. 108&109 (1982) 209

[Robertson *et al.* 2007] C.F. Robertson, K.Obrtlik, B. Marini, Journal of Nuclear Materials, 366 (2007) 58

[Rodriguez 2011] D. Garcia Rodriguez, Thèse de doctorat, Université de Grenoble Institut Polytechnique de Grenoble (2011)

[Rong *et al.* 2005] Z. Rong, Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, Philos.Mag. 85 (2005) 1473

[Schäublin *et al.* 1988] R. Schäublin, P. Spätig, M. Victoria. J.Nucl.Mater. 258 (1998) 1178

[Šesták *et al.* 1971] B. Šesták, A. Seeger, Phys. Stat. Sol. B 43 (1971) 433

[Sestier 1998] K. Sestier, Thèse de l'Institut National Polytechnique de Grenoble (1998).

[Singh *et al.* 1999] B.N Singh, A.Horsewell, P.Toft, J.Nucl.Mater.271 (1999) 97

[Singh *et al.* 2001] B.N. Singh, A. Horsewell, P. Toft, J. Nucl. Mater. 271&272 (1999) 97

[Spitzig *et al.* 1970] W. A. Spitzig, A. S. Keh, Metall. Trans., 1 (1970) 2751

[Spitzig *et al.* 1970b] W. A. Spitzig, A. S. Keh, Acta Metall., 18 (1970) 1021

[Stoller *et al.* 1997] R.E. Stoller, G. R. Odette, B. D. Wirth, J. Nucl. Mater. 251 (1997) 49

[Takeuchi *et al.* 1967] S. Takeuchi, E. Furubayashi, T. Taoka, Acta Metall. 15 (1967) 1179

[Takeuchi 1968] T. Takeuchi, Trans. ISIJ 8 (1968) 251

[Tanguy 2001] B. Tanguy, Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris (2001)

[Taoka *et al.* 1964] T. Taoka, S. Takeuchi, E. Furubayashi, J. Phys. Soc. Japan 19 (1964) 701

[Terentyev *et al.* 2008a] D. Terentyev, D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, J. Phys: Condens. Matter. 20 (2008) 445007

[Terentyev *et al.* 2008b] D. Terentyev, P. Grammatikopoulos, D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, Acta Materialia, 56 (2008) 5034

[Terentyev *et al.* 2009] D. Terentyev, Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, Philos. Mag, 90 (2010) 1019

[Terentyev *et al.* 2010a] D. Terentyev, Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, Acta Materialia, 58 (2010) 2477

[Terentyev *et al.* 2010b] D. Terentyev, Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, Scripta Mat. 62 (2010) 697

[Terentyev *et al.* 2011] D. Terentyev, L.Malerba, G.Bonny, A.T. Al-Motasem, M.Posselt, J.Nucl.Mater. 419 (2011) 134

[Terentyev *et al.* 2012]D. Terentyev, N. Anento, A. Serra, J. nucl. Mater. 420 (2012) 9

[Van Der Walt 1969] C. M. Van Der Walt, Acta Metall. 17 (1969) 393

[Ventelon *et al.* 2010] L. Ventelon, F. Willaime, Phil. Mag., 90 (7–8) (2010) 1063

[Victoria *et al.* 2001] M. Victoria, N. Balua, C. Bailat, Y. Dai, M.I. Luppo, R. Schäublin, B.N. Singh, J. Nucl. Mater. 276 (2000) 114

[Vogel *et al.* 1953] F. L. Vogel, Jr., R. M. Brick, J. Metall AIME, 197 (1953) 700

[Zinkle *et al.* 2006] S.J. Zinkle, B.N. Singh, J.Nucl.Mater. 351 (2006) 269

Chapitre 2 : Méthodologie

Table des matières

Introduction **43**

2.1 Place de la Dynamique des Dislocations dans une approche multi-échelles **43**

2.2 Principes généraux de la Dynamique des Dislocations **44**

2.2.1 Historique 44

2.2.2 Algorithme général 46

2.2.3 Conditions aux limites 53

2.2.4 Mode de contrôle des simulations dans NUMODIS 54

2.3 Introduction de boucles d'irradiation dans NUMODIS **55**

2.4 Identification des paramètres rayon de cœur 'a' et tension de cœur 'α_{core}' **60**

Bibliographie **63**

Introduction

Dans ce chapitre, nous présenterons l'outil au centre de notre étude, à savoir la Dynamique des Dislocations (DD). Nous replacerons tout d'abord cet outil dans le contexte de simulation multi-échelles des matériaux irradiés, en montrant en quoi il peut bénéficier des apports de la Dynamique Moléculaire et en quoi il peut fournir des éléments pertinents à l'échelle de la plasticité cristalline.

Nous présenterons ensuite les principes et les aspects techniques qui régissent les simulations de DD en nous concentrant sur le fonctionnement du code de calcul NUMODIS utilisé au cours de cette thèse. Nous aborderons la méthode de discrétisation, les règles de calcul des forces sur les nœuds, la loi de mobilité utilisée, le traitement des collisions et des jonctions, les conditions aux limites et les modes de pilotage en contrainte ou en déformation.

Une partie sera ensuite consacrée à la prise en compte explicite des boucles d'irradiation dans NUMODIS. Enfin, nous présenterons les résultats de simulations élémentaires qui, en les confrontant aux résultats classiques de Foreman [Foreman 1967], nous servent à identifier deux paramètres matériau et à calibrer notre code.

2.1 Place de la Dynamique des Dislocations dans une approche multi-échelles

Dans une étude multi-échelles de la plasticité des matériaux cristallins (voir la Figure 2.1), la Dynamique des Dislocations est un outil permettant de faire le lien entre l'échelle atomique traitant des propriétés élémentaires des dislocations et l'échelle du comportement d'un agrégat cristallin.

Les simulations par Dynamique Moléculaire (DM) permettent la compréhension des mécanismes de déformation élémentaires des matériaux en suivant, dans le temps, le comportement de tous les atomes constituants le volume étudié. Elles s'appuient pour cela sur des potentiels, très souvent empiriques, qui définissent les forces interatomiques. De nombreuses études sont reportées dans la littérature sur des propriétés élémentaires des dislocations comme leurs structures de cœur [Chaussidon *et al.* 2006, Domain *et al.* 2005], leurs mobilités dans les différents plans de glissement [Terentyev *et al.* 2007, 2010, Monnet *et al.* 2009, Queyreau *et al.* 2011], les réactions entre deux dislocations ou avec d'autres défauts cristallins [Bacon *et al.* 2006, Terentyev *et al.* 2008a, 2008b] ou des impuretés [Harry *et al.* 2002a, 2002b]. Elles donnent ainsi accès à des informations qui peuvent être *directement utilisables* comme paramètres d'entrée pour des modèles à l'échelle supérieure comme la mobilité des dislocations, mais aussi des informations *indirectes* comme les mécanismes et les forces d'interactions entre dislocations et obstacles. Ces informations indirectes sont particulièrement intéressantes pour valider des simulations réalisées avec la DD comme nous le présenterons dans les chapitres 3 et 4.

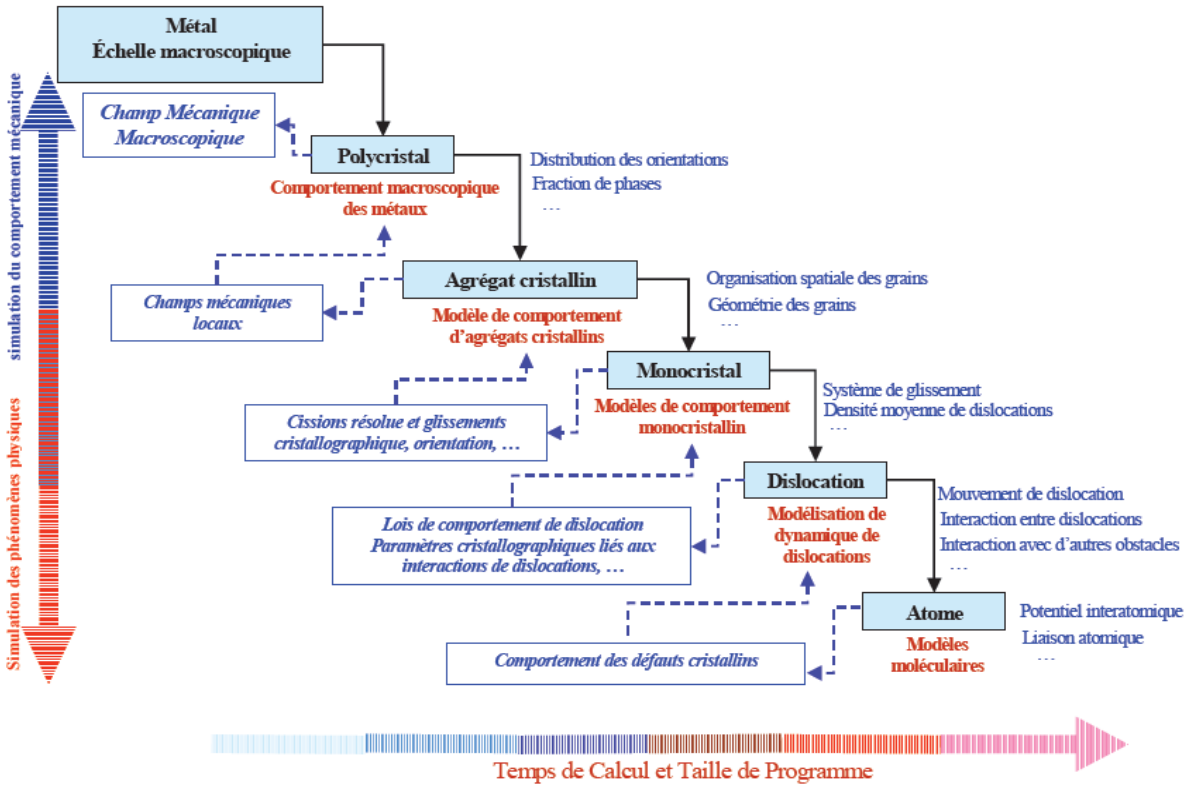


Figure 2.1 Etudes du comportement plastique d'un polycristal à différentes échelles. [Saai 2008]

Les simulations à l'échelle atomique comme la Dynamique Moléculaire (DM) sont toutefois limitées à de petits éléments de volume, de l'ordre de 10^3 nm^3 [D.J. Bacon *et al.* 2006] [Terentyev *et al.* 2008a], et à un intervalle de temps physique de l'ordre de quelques nanosecondes. Elles ne peuvent donc pas servir à calculer le comportement mécanique d'un agrégat cristallin représentatif de la plupart des matériaux étudiés dont le volume est de l'ordre du mm^3 et avec des temps de sollicitation typiquement de l'ordre de la seconde. Cette tâche est plus naturellement dédiée à l'échelle continue et plus particulièrement à la plasticité cristalline [Monnet *et al.* 2013].

Entre ces deux échelles séparées de plusieurs décades, tant en espace qu'en temps, on utilise généralement les simulations de DD qui sont précisément dédiées aux études du comportement plastique depuis une modélisation des interactions et des mouvements d'une population réaliste de dislocations dans un volume de l'ordre de 10^3 μm^3 [Kubin 2013]

2.2 Principes généraux de la Dynamique des Dislocations

2.2.1 Historique

Dans les années 60, Foreman [Foreman *et al.* 1966, Foreman 1967] a développé les premiers codes de dynamique des dislocations en 2 dimensions (2D) permettant de suivre le mouvement d'une dislocation

dans son plan de glissement. Ces codes ont été utilisés pour évaluer les contraintes critiques de franchissement d'obstacles ponctuels et pour calculer la contrainte d'activation d'une source de Frank-Read. D'autres auteurs ont, plus tard, développé des codes permettant d'étudier les interactions entre plusieurs dislocations rectilignes infinies en 2D en se plaçant perpendiculairement à leur plan de glissement [Lépinoux *et al.* 1987, Ghoniem *et al.* 1988].

Reconnaissant, au début des années 1990, la nécessité de traiter certains mécanismes dans leur complexité tri-dimensionnels, les premiers codes de dynamique des dislocations en 3D ont ensuite été développés [Canova *et al.* 1991, Kubin *et al.* 1992]. Ces codes permettaient ainsi de prendre en compte sans hypothèses simplificatrices fortes les mécanismes de multiplication des dislocations, de glissement dévié, de montée ou la formation de jonctions. Cette technique a connu depuis un essor important [Devincre 1996, Hirth *et al.* 1996, Fivel *et al.* 1997, Ghoniem *et al.* 1997, Schwartz 1997, Zbib *et al.* 2000, Devincre *et al.* 2001, Weygand 2003, Bulatov *et al.* 2004] et a permis de traiter de nombreux problèmes physiques : le comportement plastique dans une latte de fer [Chaussidon *et al.* 2010]; le chargement en fatigue [Shin *et al.* 2005]; la formation de bandes claires [Nogaret *et al.* 2008]; le durcissement par la forêt, par les précipités ou par les défauts cristallins [Devincre 1994, Mohles 2001, Madec *et al.* 2002, Arsenlis *et al.* 2002, Monnet 2006, Queyreau 2008, Naamane 2008], etc.

Les codes de DD peuvent globalement être regroupés en deux catégories (Figure 2.2) selon la façon dont sont discrétisées les dislocations : les codes à base de *segments* [par exemple *microMégas* (LEM, CNRS-ONERA) ou *Tridis* (SIMaP, Grenoble INP)] et les codes *nodaux* [par exemple *NUMODIS* (CEA, INPG, Université de Paris XII) ou *Paradis* (LLNL, USA)].

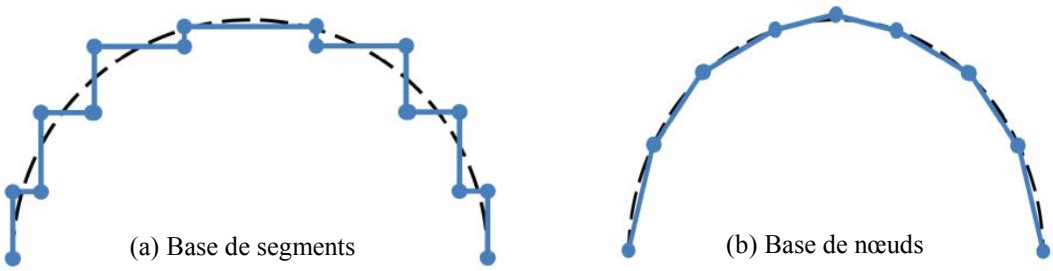


Figure 2.2 Discrétisation d'une dislocation dans les codes à base de segments (a) et les codes nodaux (b)

Les codes à base de segment discrétisent les dislocations avec un nombre fini de directions de segments (correspondant aux directions vis, coin ou mixtes) et occupant des positions discrètes sur un réseau de simulation homothétique du vrai réseau cristallin. Les codes nodaux reposent sur une discrétisation des dislocations par des nœuds connectés par des segments, sans restriction particulière sur le caractère de ces segments ou sur la position des nœuds aux extrémités des segments.

Dans ce travail, nous avons utilisé le code nodal de DD appelé NUMODIS qui est développé par le CEA Saclay et des partenaires universitaires en France (INPG, Université de Paris XII et INRIA Bordeaux).

2.2.2 Algorithme général

Indépendamment de la discrétisation utilisée, un calcul de DD repose sur le suivi au cours du temps d'un ensemble de dislocations interagissant élastiquement. On distingue à chaque pas de temps quatre étapes principales :

1) Discrétisation des dislocations par des segments ou par des nœuds.

2) Calcul des forces sur chaque segment ou chaque nœud.

3) Calcul des vitesses depuis une loi de mobilité et des déplacements de chaque segment ou de chaque nœud à partir des forces calculées en 2).

4) Gestion des déplacements et des collisions des dislocations avec différents obstacles : dislocations elles-mêmes ou microstructure (précipités, joints de grains…).

2.2.2.1 *Discrétisation des lignes de dislocations*

Le code NUMODIS repose sur une discrétisation des dislocations par nœuds reliés par des segments droits comme indiqué schématiquement sur la Figure 2.2-b. Sur cette figure, la ligne brisée bleue est utilisée par NUMODIS pour représenter la dislocation pointillée noire. Plus les nœuds sont nombreux et rapprochés, plus la discrétisation se rapproche de la courbe d'une dislocation continue. En revanche, cette augmentation du nombre de nœuds se traduit numériquement par une augmentation des temps de calcul. Ce compromis est géré dans NUMODIS par deux paramètres de discrétisation: 'l_{min}' qui détermine la distance minimale entre deux nœuds voisins et 'l_{max}' qui fixe la distance maximale entre deux nœuds.

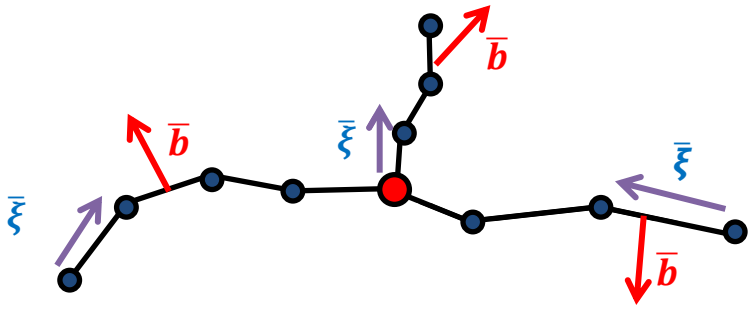


Figure 2.3 Définition et présentation des dislocations dans NUMODIS

Dans NUMODIS est attribué à chaque segment de dislocation un sens de parcours, un vecteur de Burgers $\bar{b}$ ainsi qu'un plan de glissement $\bar{n}$. Ce dernier contient à la fois $\bar{\xi}$, le vecteur unitaire tangent au segment ainsi que le vecteur de Burgers.

On distingue également deux types de nœuds comme présenté sur la Figure 2.3: les *nœuds physiques* (en rouge), qui se trouvent à l'intersection de deux ou plusieurs segments ne partageant pas les mêmes vecteurs de Burgers et plan de glissement, et les *nœuds topologiques,* qui servent avant tout à discrétiser une ligne de dislocation possédant un vecteur de Burgers et un plan de glissement unique.

2.2.2.2 *Calcul des forces sur les dislocations*

Le calcul des forces s'exerçant sur les dislocations se fait souvent dans le cadre de l'hypothèse de l'élasticité isotrope linéaire. La force sur un segment est alors une somme de plusieurs contributions de contraintes distinctes : Une partie est due au champ de contrainte appliquée macroscopiquement $\bar{\bar{\sigma}}^{app}$ et une autre partie est due au champ de contrainte produit par tous les segments présents dans l'élément simulé $\bar{\bar{\sigma}}^{int}$. La force s'exerçant sur un élément *dl* d'une dislocation est la force de Peach et Koehler qui s'écrit :

$$\bar{f}^{PK}(l) = \left\{\left[\left(\bar{\bar{\sigma}}^{app} + \bar{\bar{\sigma}}^{int}\right)\bar{b}\right]\Lambda\bar{\xi}_l\right\} \tag{1}$$

Avec $\bar{\xi}_l$ le vecteur unitaire tangent à l'élément *dl*, $\bar{b}$ le vecteur de Burgers, $\bar{\bar{\sigma}}^{app}$ la contrainte extérieure appliquée et $\bar{\bar{\sigma}}^{int}$ la contrainte interne.

Pour une dislocation ou une boucle de dislocation, la contrainte interne en un point x peut être exprimée comme une intégrale sur l'ensemble des dislocations [Mura 1982]:

$$\bar{\bar{\sigma}}^{int} = \sigma_{ij}(\bar{\mathrm{x}}) = C_{ijkl}\oint_{dislocations} \varepsilon_{lnh}C_{pqmn}G_{kp,q}(\bar{\mathrm{x}} - \bar{\mathrm{x}}')b_m dx'_h \tag{2}$$

avec $G_{kp,q} = \partial G_{kp}/\partial x_q$. Ici, C_{ijkl} est le tenseur des modules élastiques du matériau, ε_{lnh} est le symbole de Levi-Civita qui est un indicateur antisymétrique et $G_{kp,q}(\bar{\mathrm{x}} - \bar{\mathrm{x}}')$ est la fonction de Green qui peut être simplifiée dans la théorie élastique isotrope :

$$G_{ij}(\bar{\mathrm{x}} - \bar{\mathrm{x}}') = \frac{1}{8\pi\mu}\left[\delta_{ij}\partial_p\partial_p R - \frac{1}{2(1-v)}\partial_i\partial_j R\right] \tag{3}$$

où μ est la module de cisaillement isotrope, v est le coefficient de poisson, $\partial i = \partial/\partial x_i$ et $R = \|\bar{\mathrm{x}} - \bar{\mathrm{x}}'\|$. Le champ de contrainte peut aussi être exprimé par la formule suivante :

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\beta}(\bar{\mathrm{x}}) = \frac{\mu}{8\pi}\oint \partial_i\partial_p\partial_p R\left[b_m\varepsilon_{im\alpha}dx'_\beta + b_m\varepsilon_{im\beta}dx'_\alpha\right] \\ + \frac{\mu}{4\pi(1-v)}\oint b_m\varepsilon_{imk}\left(\partial_i\partial_\alpha\partial_\beta R - \delta_{\alpha\beta}\partial_i\partial_p\partial_p R\right)dx'_k\end{aligned} \tag{4}$$

Ici, il faut noter que quand deux points $\bar{\mathrm{x}}'$ et $\bar{\mathrm{x}}$ sont très proches, ce qui est le cas quand on cherche à calculer les contraintes exercées par une dislocation sur elle-même, R va tendre vers zéro et les composantes du tenseur des contraintes vont diverger. Par conséquent, la force exercée par la dislocation sur elle-même diverge aussi, ce qui pose des problèmes à la fois théoriques et numériques.

Le caractère divergeant de la contrainte dans la théorie classique a suscité plusieurs formulations alternatives dont la plus notable est celle de Peierls-Nabarro [Nabarro 1947, 1967]. Ces modèles visent, dans le cadre d'une formulation élastique, à supprimer la divergence naturelle de la contrainte en étalant de façon heuristique la déformation plastique d'une dislocation dans un cœur de dimension finie. On parle alors de *théorie élastique non divergente*.

Une façon de régulariser le champ singulier des dislocations consiste à tronquer l'intégration dans l'équation (4) et à mettre l'intégration égale à zéro quand R est inférieur à un rayon de cœur 'a'. Plusieurs modèles s'appuyant sur cette solution simple existent comme la 'self-stress' et 'la tension de ligne' décrits dans la littérature [L.P. Kubin 2013]. Une autre approche proposée par Cai [Cai *et al.* 2006] revient à remplacer R par $R_a = \sqrt{R^2 + a^2}$ dans toutes les équations concernées. Ce modèle s'impose depuis quelques années car il est numériquement bien adapté à la DD et ne fait usage, en plus des coefficients élastiques, que d'un seul paramètre de rayon de cœur 'a'.

Le champ de contrainte interne devient alors :

$$\begin{aligned}\bar{\bar{\sigma}}^{int} = \sigma_{\alpha\beta}(\bar{x}) = \frac{\mu}{8\pi}\oint \partial_i\partial_p\partial_p R_a\left[b_m\varepsilon_{ima}dx'_\beta + b_m\varepsilon_{im\beta}dx'_\alpha\right] \\ + \frac{\mu}{4\pi(1-\nu)}\oint b_m\varepsilon_{imk}\left(\partial_i\partial_\alpha\partial_\beta R_a - \delta_{\alpha\beta}\partial_i\partial_p\partial_p R_a\right)dx'_k\end{aligned} \quad (5)$$

La discrétisation des dislocations en segments permet de décomposer cette intégrale en une somme d'intégrales élémentaires, qu'il est possible de calculer analytiquement. On obtient ainsi[1] :

$$\sigma(\bar{x}) = \sum_{Segment\ i}^{N} \sigma^i_{\alpha\beta}(\bar{x}) \quad (6)$$

Cette méthode non-divergente permet de calculer analytiquement le champ de contrainte d'une dislocation et d'éviter la singularité dans les calculs numériques. Mais en revanche, comme indiqué par Bulatov [Bulatov *et al.* 2006], la théorie élastique, même non-divergente, ne peut pas toujours décrire la physique des dislocations quand la distance est inférieure à leur rayon de cœur 'a'. On peut alors *ajouter* une *énergie de cœur par unité de longueur* $E_{core}(\theta)$ qui dépend a priori de l'orientation de la ligne par rapport au vecteur de Burgers. Les calculs atomistiques évaluent traditionnellement cette énergie à une petite fraction (typiquement 10%) de l'énergie élastique totale de la dislocation e.g. [Hull *et al.* 2001] [Kubin 2013]. Dans le code NUMODIS, le choix est fait de rendre cette énergie de cœur directement proportionnelle à l'énergie élastique par unité de longueur d'une dislocation rectiligne infinie (e.g. [Hull *et al.* 2001]) à l'aide d'un paramètre tension de cœur 'α_{core}' :

$$E_{core}(\theta) = \alpha_{core} * E_{elastique}(\theta) = a_{core} * \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)}(1 - \nu\cos^2\theta)\ln(\frac{R_0}{r_0}) \quad (7)$$

Ici μ et ν sont les constantes élastiques, b est la norme du vecteur de Burgers, R_0 et r_0 est le rayon externe et interne d'une dislocation rectiligne infinie. Cette énergie se traduit alors, à l'échelle d'un élément de dislocation *ds*, par deux forces F, exercées à ces extrémités (voir la Figure 2.4-b) [De Wit *et al.* 1959] [Dupuy *et al.* 2002], données par la formule suivante :

$$\bar{F}_{core}(\theta) = E_{core}(\theta) * \bar{T} + \frac{dE_{core}(\theta)}{d\theta} * \bar{N} \quad (8)$$

[1] Le calcul des forces sur chaque nœud nécessite ici une somme sur l'ensemble des N segments, ce qui représente un coût total de N*N calculs élémentaires. Ce calcul est de fait l'étape la plus coûteuse en temps pour un code de DD

qui est donc essentiellement tangentielle au vecteur ligne de la dislocation (suivant $\overline{T}$). La résultante de ces deux forces sur un segment *ds* est donc une force normale à la dislocation (suivant $\overline{N}$), dite de tension de ligne (voir la Figure 2.4-a), qui est donnée par la formule suivante (κ est la courbure locale de la dislocation) :

$$\overline{T_{ds}}(\theta) = \kappa * T(\theta) * ds * \overline{N} = \kappa * \left(E_{core}(\theta) + \frac{d^2 E_{core}}{d\theta^2}(\theta) \right) * ds * \overline{N} \tag{9}$$

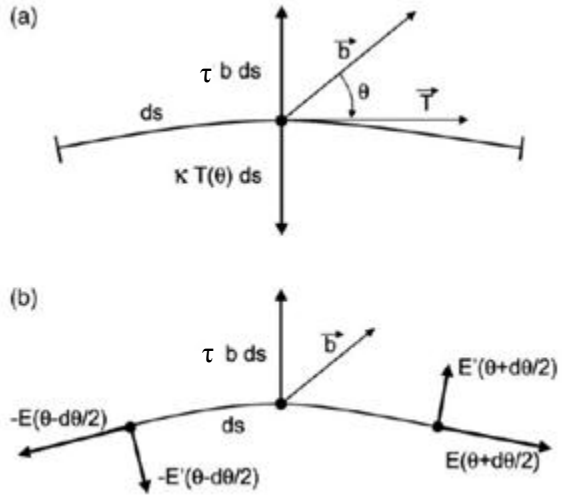


Figure 2.4 Présentation des forces dans un segment de la dislocation [Dupuy *et al.* 2002]

On note dans ce formalisme que la force s'exerçant sur un nœud multiple à l'intersection de plusieurs dislocations est donné par la somme de ces forces élémentaires :

$$\overline{F_{core}^{totale}} = \sum_{1}^{P} \bar{F}_{core}(\theta) \tag{10}$$

On note que plus 'α_{core}' est élevé, plus l'énergie de cœur sera élevée, et plus la tension de ligne sera forte.

Nous discuterons ultérieurement dans ce chapitre la question du choix des paramètres 'a' et 'α_{core}'.

2.2.2.3 *Calcul des vitesses*

Une fois connue les forces qui s'appliquent sur les dislocations, une loi de mobilité est utilisée pour en déduire les vitesses de déplacement.

Dans notre étude, nous avons retenu des lois de mobilité aussi simples que possible pour reproduire le comportement du Fer à haute température. Nous avons ainsi utilisé une loi visqueuse classique qui s'écrit:

$$v^s = \frac{< \left|\tau_{eff}^s\right| - \tau_0^s >* b}{B^s} \tag{11}$$

Où <.> sont les crochets de McCauley (<u>= u, quand $u > 0$, et <u>= 0 sinon), τ_{eff}^{s} la cission effective comme illustré dans la Figure 2.4 est calculée par l'équation suivante :

$$\tau_{eff} = \frac{1}{b}[(\bar{F}^{PK} \bullet \bar{N}) + (\kappa * T(\theta))] \tag{12}$$

Il s'agit de la somme d'une projection de la force de Peach et Koehler calculée par l'équation (1) dans la direction de déplacement des dislocations $\bar{N}$ et la tension de ligne par l'équation (9). τ_0^s une contrainte seuil ou de frottement sec sur le système *s* en dessous de laquelle on considère que tout mouvement de dislocation est impossible. On suppose dans la suite que cette contrainte seuil reste constante. b est la norme du vecteur de Burgers de la dislocation et B^s est un coefficient de viscosité dans le plan de glissement '*s*'. L'identification de τ_0^s et de B^s pour les différents systèmes de glissement envisagés fait l'objet du chapitre suivant.

Il faut remarquer ici que cette loi n'est pas appropriée quand la mobilité des dislocations est contrôlée par des mécanismes thermiquement activés, comme le mouvement des dislocations vis contrôlé à basse température par la formation de doubles décrochements dans les métaux cubique centrés. Une autre loi de mobilité adaptée à ces problématiques doit alors être appliquée [e.x. Tang *et al.* 1998, Naamane 2008, Chaussidon 2006].

Dans un code nodal comme NUMODIS ou Paradis (Bulatov *et al.* 2006), le calcul des vitesses nodales s'effectue sur la base d'un calcul de type éléments-finis sur des objets linéiques que sont les segments de dislocation. Nous résumons ici le principe de ce calcul.

La première étape consiste en l'introduction d'une interpolation linéaire des vitesses de déplacement, le long des dislocations, à partir des vitesses de déplacement des nœuds. Ainsi la vitesse d'un point arbitraire sur un segment dl entre deux nœuds "i" et "$i+1$" s'écrit comme :

$$\bar{v}(\bar{x}) = N_i(\bar{x}) * \bar{v}_i(\bar{x}) + N_{i+1}(\bar{x}) * \bar{v}_{i+1}(\bar{x}) = \sum_i N_i(\bar{x}) * \bar{v}_i(\bar{x}) \tag{13}$$

Ici $N_i(\bar{x})$ est la fonction linéaire de zéro à un entre les deux nœuds. $\bar{v}_i$ est la vitesse du nœud "i" et puis $\bar{v}_{i+1}$ est la vitesse du nœud "$i+1$".

Ecrivons ensuite, dans le cadre d'un régime linéaire visqueux amorti, l'équilibre des forces conservatives motrices $\bar{F}^{driving}(\bar{x})$ et de la force visqueuse dissipative $\bar{F}^{drag}(\bar{x})$ le long de la dislocation :

$$\bar{F}^{driving}(\bar{x}) + \bar{F}^{drag}(\bar{x}) = \bar{0} \tag{14}$$

Ici $\bar{F}^{driving}(\bar{x})$ est la dérivée de l'énergie potentielle totale $E_{total}(\bar{x}, \bar{b})$ de la dislocation au point $\bar{x}$:

$$\bar{F}^{driving}(\bar{x}) = -\frac{\partial E_{total}(\bar{x}, \bar{b})}{\partial \bar{x}} \tag{15}$$

et $\bar{F}^{drag}(\bar{x})$ est définie par la loi de mobilité avec un tenseur de coefficient de viscosité $\bar{\bar{B}}(\bar{x})$:

$$\bar{F}^{drag}(\bar{x}) = -\bar{\bar{B}}(\bar{x}) * \bar{v}_i(\bar{x}) \tag{16}$$

Nous obtenons alors en insérant l'équation (16) dans l'équation (14) :

$$\bar{F}^{driving}(\bar{x}) = \bar{\bar{B}}(\bar{x}) * \bar{v}_i(\bar{x}) \tag{17}$$

Ne pouvant satisfaire l'équation (14) ou (16) en tout point de la dislocation en utilisant un champ de vitesse donné par l'équation (13), nous nous rabattons sur une formulation faible de ce problème sous la forme du Principe des Puissances Virtuelles. Nous recherchons alors le champ de vitesse $\overline{v^s}(\bar{x})$ tel que

$$\oint_{dislocation} \left[\bar{F}^{driving}(\bar{x}) + \bar{F}^{drag}(\bar{x})\right] \cdot [\bar{v}(\bar{x}) + \tilde{v}(\bar{x})] * dl(\bar{x}) = 0 \tag{18}$$

Quel que soit le champ de vitesse $\bar{v}(\bar{x})$ cinématiquement admissible.

Déroulant ce calcul classique des éléments-finis, nous définissons la force nodale s'exerçant sur le nœud i par :

$$\bar{F}_i^{driving} = \oint_{dislocation} N_i(\bar{x}) * \bar{F}_i^{glide}(\bar{x}) dl(\bar{x}) \tag{19}$$

ainsi que la matrice de viscosité $\bar{\bar{B}}_{ij}$ entre les nœuds i et j par :

$$\bar{\bar{B}}_{ij} \equiv \oint_{dislocation} N_i(\bar{x}) * \bar{\bar{B}}(\bar{x}) * N_j(\bar{x}) * dl(\bar{x})$$

dans le cas où les nœuds i et j sont reliés par un segment (0 sinon).

L'assemblage de toutes ces matrices élémentaires conduit à un système linéaire suivant :

$$\sum_i \bar{\bar{B}}_{ij} * \bar{v}_j = \bar{F}_i^{driving} \tag{20}$$

dont la résolution permet de déduire les vitesses nodales. Notons au passage que la puissance dissipée par l'ensemble des dislocations s'écrit :

$$\dot{W} = \oint_{dislocation} \bar{F}^{driving}(\bar{x}) \cdot \bar{v}(\bar{x}) * dl(\bar{x}) = \sum_i \bar{F}_i^{driving} \cdot \bar{v}_i \tag{21}$$

2.2.2.4 *Gestion des collisions*

Une collision peut survenir entre plusieurs dislocations mais aussi entre une dislocation et un autre élément de la microstructure comme un joint de grain ou un précipité. Le code détecte automatiquement si une collision va avoir lieu, crée un nouveau point au niveau de la collision, fixe ce point pendant le pas de temps et laisse le reste de la microstructure évoluer pendant le pas de temps.

Un des atouts de NUMODIS est qu'il permet de reproduire la formation des jonctions sans avoir à définir des règles locales spécifiques. Il reprend ici pour l'essentiel l'algorithme proposé par [Bulatov *et al.* 2006]. Prenons l'exemple d'un nœud connecté par quatre segments de dislocations (voir la Figure 2.5) pour expliquer cet algorithme.

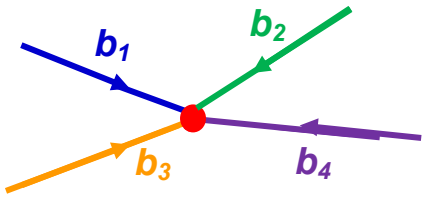


Figure 2.5 Schéma d'un nœud multiple issu de la collision de plusieurs segments de dislocation.

A priori, ce nœud multiple peut évoluer de quatre façons différentes comme indiquées dans la Figure 2.6 ci-dessous :

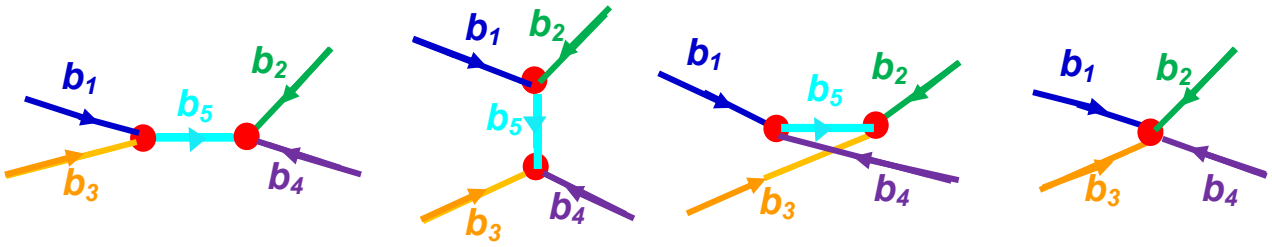


Figure 2.6 Les quatre évolutions possibles d'un nœud multiple

Dans la première possibilité, le segment (de vecteur de Burgers) $\bar{b}_1$ et le segment $\bar{b}_3$ se connectent en un même point tandis que $\bar{b}_2$ et $\bar{b}_4$ se connectent en un autre point; Pour la deuxième possibilité, ce sont $\bar{b}_1$ et $\bar{b}_2$ qui se connectent en un même point alors que $\bar{b}_3$ et $\bar{b}_4$ se connectent en un autre nœud ; Pour la troisième possibilité, ce sont les segments $\bar{b}_1$ et $\bar{b}_4$ qui se connectent en un même nœud et $\bar{b}_2$ et $\bar{b}_3$ qui se regroupent sur un autre ; Enfin, la dernière possibilité est que la configuration initiale reste inchangée.

Partant de ces 4 possibilités et en supposant que tous les autres nœuds de la microstructure de dislocation restent immobiles, le code calcule par l'équation suivante l'énergie dissipée pour chaque situation et retient la configuration qui maximise cette dissipation.

$$P = \sum \bar{F}.\bar{V} \tag{22}$$

Ici $\bar{F}$ est la force et $\bar{V}$ la vitesse d'un nœud. A la fin du pas de calcul, NUMODIS refait le maillage pour toute la boite de simulation et puis recommence le prochain pas de calcul.

2.2.3 Conditions aux limites

L'essentiel des simulations de DD effectuées durant cette thèse cherchaient à reproduire des résultats de DM publiés dans la littérature sur des monocristaux de Fer irradié. Afin de simplifier la comparaison entre les simulations en DM et en DD, nous avons eu recours à des conditions aux limites périodiques (CLP) pour nos simulations Bulatov *et al.* 2001]. Dans le principe, des CLP reviennent à considérer qu'une boite de simulation est entourée de boites identiques dans plusieurs directions de l'espace (voir une illustration en 2D sur la Figure 2.7 ci-dessous). Ainsi, les déplacements des nœuds sur le bord droit de la boite rouge centrale correspondent aux déplacements sur le bord gauche de la boite située à droite de la boite rouge. Comme toutes les simulations de chaque boite doivent être identiques, cela implique au final que les déplacements sur le bord droit de la boite rouge doivent correspondre en tout point aux déplacements sur son bord gauche (ou on peut considérer que un nœud au bord gauche est identique de celui au bord droit). Ces CLP nous permettent ainsi de réaliser à moindre coût de calcul des simulations avec une grande densité de dislocations et d'obstacles sans avoir à prendre en compte des effets élastiques complexes associés à l'existence de bords finis dans les volumes simulés. Durant notre étude et pour des raisons de performance numérique, la portée des interactions élastiques a été coupée à la première image voisine.

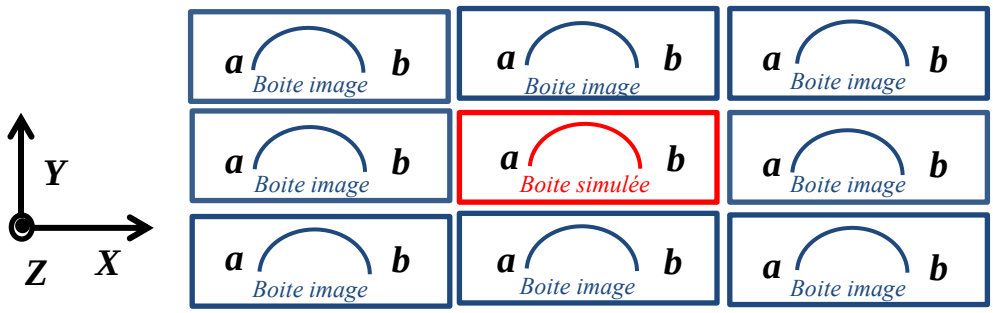


Figure 2.7 Schématisation des Conditions aux Limites Périodiques (CLP) dans un calcul de DD: une source de Frank-Read est présentée dans une boite de simulation.

Toujours pour faciliter la comparaison entre simulations de DD et de DM, nous avons repris dans les simulations présentées au chapitre suivant le même repère de coordonnées local que celui utilisé dans les travaux de DM. Un exemple est reporté sur la Figure 2.8 où l'on voit que l'axe X suit la direction de [111], l'axe Y suit la direction de $[\bar{1}\bar{1}2]$ et enfin l'axe Z suit la direction de $[1\bar{1}0]$.

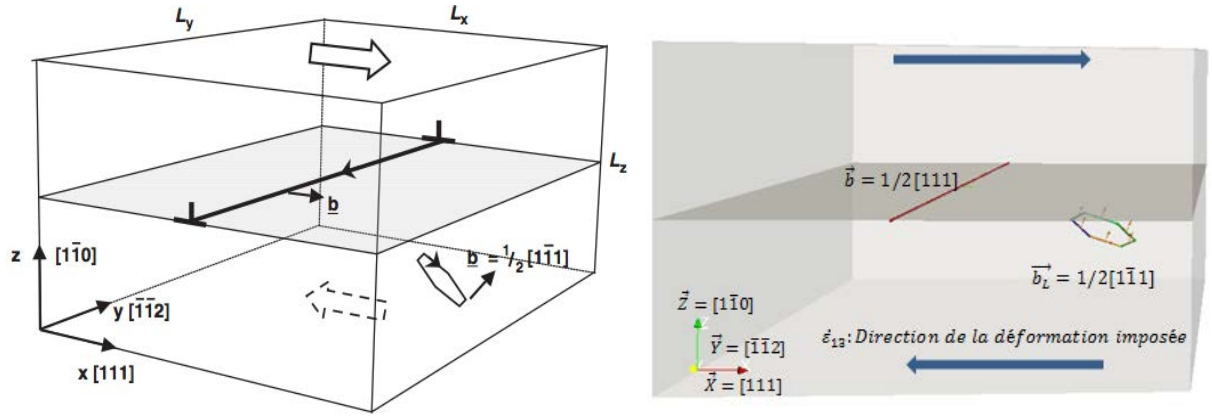


Figure 2.8 Les boites de simulation utilisées en DM [Bacon *et al.* 2006] et en DD dans le cas de simulations d'une interaction entre une dislocation coin et une boucle d'irradiation : la dislocation coin se situe dans le plan $(1\bar{1}0)$ avec son vecteur de burgers ½ [111] suivant l'axe *x*.

2.2.4 Mode de contrôle des simulations dans NUMODIS

Il existe deux moyens principaux pour contrôler l'évolution des simulations dans NUMODIS : soit en imposant une contrainte appliquée, soit en imposant une vitesse de déformation.

Le pilotage des simulations par l'application d'une contrainte extérieure est le mode de pilotage naturel de la DD, puisque, comme nous venons de le voir, la vitesse de déplacement des nœuds découle des forces nodales, donc de la contrainte appliquée. Ce mode de pilotage permet par exemple de déterminer aisément les contraintes d'activation d'une source de Franck-Read. Mais, lorsque l'on simule les interactions entre une dislocation et des obstacles, cette méthode peut conduire à surestimer la contrainte nécessaire à certains mécanismes. Dans ces conditions, un pilotage en vitesse de déformation totale semble plus adapté. En outre, le mode naturel de pilotage des simulations de DM, auxquelles nous nous comparerons, repose sur l'application d'une vitesse de déformation imposée. C'est donc ce dernier mode de pilotage que nous avons retenu.

Le pilotage par vitesse de déformation totale imposée repose sur le calcul de la déformation induite par le mouvement des dislocations qui est donnée par l'équation suivante :

$$\bar{\bar{\varepsilon}}_{Plastique} = \sum_{segments} \frac{b_i n_j + b_j n_i}{2\Omega} * dA \tag{23}$$

Ici b_i sont les composantes du vecteur de Burgers $\bar{b}$, n_i sont les composantes du vecteur normal au plan de glissement $\bar{n}$, dA est la surface parcourue par le segment de dislocation considéré et Ω est le volume de la boite de simulation.

La vitesse de déformation plastique à chaque pas de simulation s'écrit alors :

$$\frac{d\bar{\bar{\varepsilon}}_{Plastique}}{dt} = \sum_{segment} \frac{b_i n_j + b_j n_i}{2\Omega} * \frac{dA}{dt} \tag{24}$$

Après chaque pas de calcul dt, l'écart entre la déformation totale imposée et la déformation plastique résultante est compensé par la déformation élastique $\bar{\bar{\varepsilon}}_{élastique} = \bar{\bar{\varepsilon}}_{imposée} - \bar{\bar{\varepsilon}}_{Plastique}$, par un ajustement au pas de temps suivant de la contrainte appliquée suivant la lois de Hooke :

$$\bar{\bar{\sigma}} = \bar{\bar{\bar{C}}} * \bar{\bar{\varepsilon}}_{élastique} \tag{25}$$

2.3 Introduction de boucles d'irradiation dans NUMODIS

Dans le chapitre bibliographique, nous avons montré qu'il existe deux types différents de boucles d'irradiation dans le fer : des boucles de type de ½ <111> et des boucles de type <100>.

Nous considérons tout d'abord des boucles interstitielles de type ½ <111>. Du fait de la symétrie cubique du matériau, ces boucles peuvent avoir quatre vecteurs de Burgers différents à savoir ½[111], ½[$11\bar{1}$], ½[$\bar{1}11$] et ½[$1\bar{1}1$], qui sont également les axes de glissement de ces boucles. Notons que, le vecteur de Burgers des deux premières variantes est contenu dans le plan de glissement de notre dislocation de référence.

Les boucles sont choisies de forme hexagonale avec des côtés de type <112> [Terentyev *et al.* 2007], et sont placées dans le plan de même indice que leur vecteur de Burgers. L'orientation $\vec{l}$ des segments de la boucle par rapport au vecteur de Burgers $\vec{b}$ définit le caractère interstitiel ou lacunaire de la boucle et doit donc être fixé avec soin. Dans la convention FS-RH (Finish-Start Right Hand) utilisée dans NUMODIS, les boucles interstitielles étudiées doivent être orientées dans le sens horaire comme indiqué dans la Figure 2.9 ci-dessous.

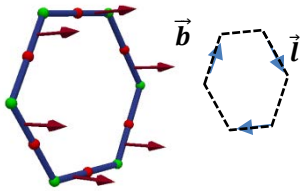


Figure 2.9 Représentation d'une boucle interstitielle dans NUMODIS.

Enfin, la taille de la boucle varie avec le nombre d'atomes interstitiels dont elle est constituée (SIAs : Self Interstitial Atoms). La relation entre la taille de la boucle et le nombre d'atomes est donnée par la formule ci-dessous :

$$d = \frac{\sqrt{2N} \times a_0}{3} \tag{26}$$

Ici d est la longueur du segment de la boucle, N est le nombre d'atomes, a_0 est le paramètre cristallin avec une valeur de 2,886 Ångström [Terentyev *et al.* 2008a] utilisée dans nos travaux.

Dans le chapitre bibliographique, nous avons déjà montré que les interactions pouvaient être différentes selon les positions relatives entre la dislocation et la boucle. Par exemple, la Figure 2.10 ci-dessous nous montre les trois plans de glissement dans lesquels une dislocation coin de vecteur de Burgers ½[111] peut se situer : les plans $(1\bar{1}0)$, $(01\bar{1})$, et $(10\bar{1})$.

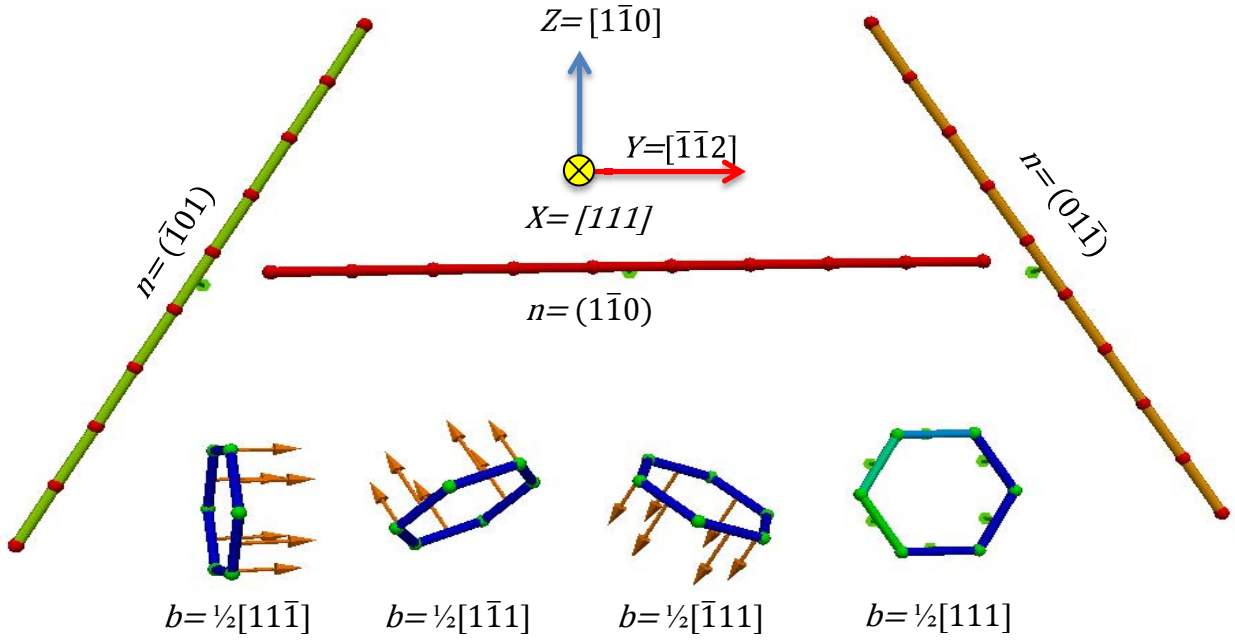


Figure 2.10 Présentation des positions possibles d'une dislocation coin de vecteur de Burgers ½ [111] et des quatre boucles de même type ½ <111>.

Il existe ainsi 3*4=12 possibilités d'interactions entre une dislocation coin de Burgers ½ [111] et une boucle interstitielle de type ½ <111>. Du fait de la symétrie cubique du cristal, nous pouvons identifier quatre situations réellement indépendantes :

Dans la première situation, que l'on l'appelle H1, le vecteur de Burgers de la boucle est identique à celui de la dislocation. Nous avons vu au chapitre bibliographique que cette configuration conduit au trainage sans contact de la boucle par la dislocation (*réaction* R_{3drag}).

H1 : $\vec{b}_{boucle} * \vec{n}_{dislocation} = 0$ *et* $\vec{b}_{boucle} = \vec{b}_{dislocation}$ → Trainage sans contact

Dans la deuxième situation, le vecteur de Burgers de la boucle diffère de celui de la dislocation mais se situe dans le plan de glissement de la dislocation. Un trainage sans contact est également observé dans cette situation mais de nature différente de celui de H1, puisque la boucle se déplace vers l'extrémité de la boite dans la direction de son vecteur de Burgers.

H2 : $\vec{b}_{boucle} * \vec{n}_{dislocation} = 0$ *et* $\vec{b}_{boucle} \neq \vec{b}_{dislocation}$ → Trainage sans contact

Dans les deux autres cas, il y a contact entre la dislocation et la boucle, avec formation plus ou moins facile de jonctions :

H3 : $\vec{b}_{boucle} * \vec{n}_{dislocation} > 0$ → Jonction

H4 : $\vec{b}_{boucle} * \vec{n}_{dislocation} < 0$ → Jonction

On note que, d'après les résultats présentés au chapitre précédents, la configuration H4 conduit à une contrainte critique de franchissement supérieure à la configuration H3.

Le second type de boucle étudié est représenté sur la Figure 2.11 ci-dessous. Il s'agit de boucles de forme carrée et possédant un vecteur de Burgers de type <100> [Terentyev *et al.* 2008a].

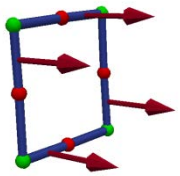


Figure 2.11 Boucle d'irradiation de type <100>

La taille de la boucle varie selon le nombre d'atomes constitué (SIAs) d'après la formule suivante :

$$d = \frac{\sqrt{2N} \times a_0}{2} \tag{27}$$

Terentyev et ses collaborateurs [DTerentyev *et al.* 2008a] ont répertorié les différentes configurations d'interaction qu'ils ont simulées en DM entre ce type de boucle et une dislocation coin de vecteur de Burgers ½ <111>. Cette classification est reportée dans la Figure 2.12 ci-dessous :

Geometry of interactions considered

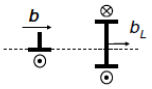
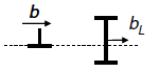
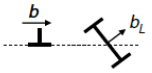
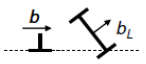
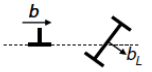
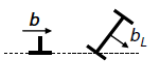
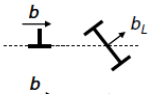
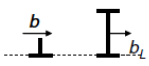
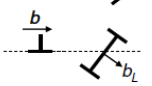
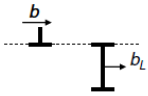
[1-10] [111] [11-2]	Configuration	b_L	Loop sides	[1-10] [111] [11-2]	Configuration	b_L	Loop sides
	C1	[001]	[110],[1$\bar{1}$0]		C6	[001]	[100],[010]
	C2	[100]	[01$\bar{1}$],[011]		C4U	[100]	[001],[010]
	C3	[010]	[101],[10$\bar{1}$]		C5U	[010]	[100],[001]
	C4	[100]	[001],[010]		C6U	[001]	[100],[010]
	C5	[010]	[100],[001]		C6D	[001]	[100],[010]

Figure 2.12 Classification des différentes interactions considérées entre une dislocation coin ayant un vecteur de Burgers ½ <111> et des boucles de type <110> pour les simulations en DM de [Terentyev *et al.* 2008a]

Pour faciliter la lecture des résultats qui vont suivre, nous avons préféré définir une nouvelle classification de ces interactions, représentée dans la Figure 2.13 et le Tableau 2.1 ci-dessous :

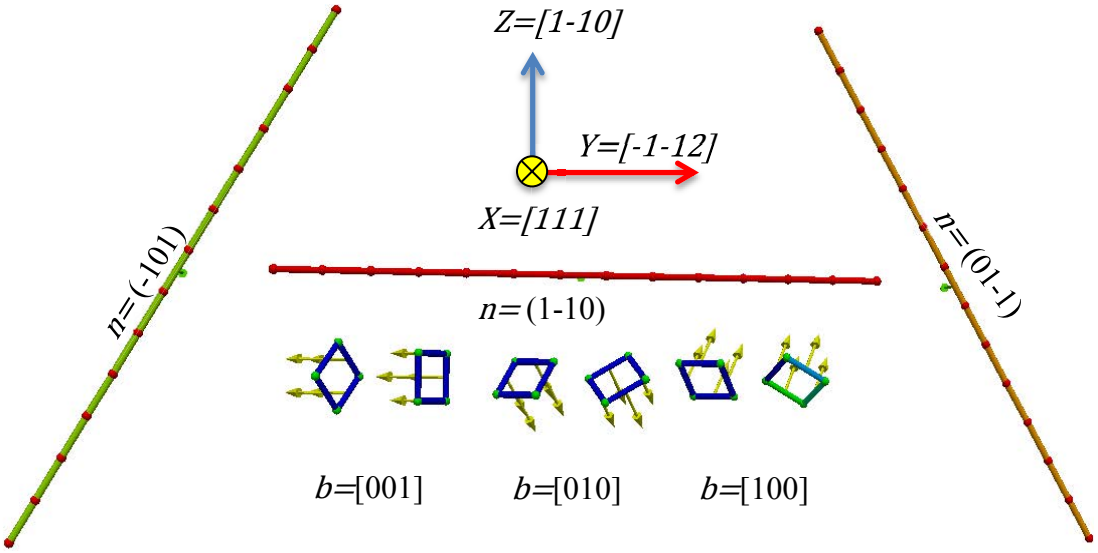


Figure 2.13 Présentation d'une dislocation coin de vecteur de Burgers ½ [111] située dans trois plans de glissement possible et des six boucles de même type <100>.

Ainsi, les configurations S_{0i}, S_{+i} et S_{-i} font référence à des configurations pour lesquelles les produits scalaires entre le vecteur de Burgers de la boucle et la normale au plan de glissement sont respectivement nuls, positifs ou négatifs. L'indice i vaut zéro lorsque les côtés de la boucle sont selon les directions <100> et vaut 1 lorsqu'ils sont selon les directions <110>.

A partir de ces six configurations, nous pouvons reprendre la dénomination retenue dans [Terentyev *et al.* 2008a] pour signaler la position relative de la boucle par rapport au plan de glissement de la dislocation. L'indice 'U' pour Up signifie que la boucle est au-dessus du plan de glissement tandis que l'indice 'D' pour Down signifie que la boucle est en-dessous du plan de glissement.

Finalement, la configuration C4U définie dans [Terentyev *et al.* 2008a] devient maintenant $S_{+0}U$.

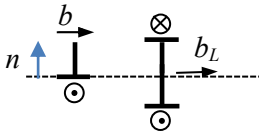
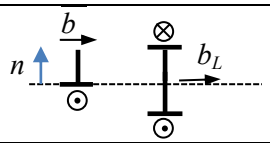
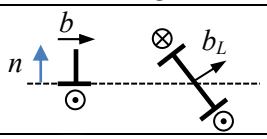
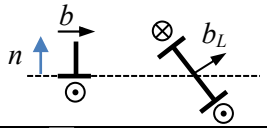
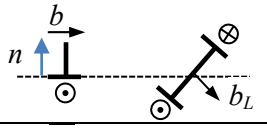
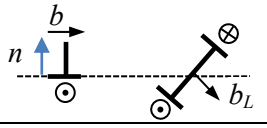
Nom	Schéma	Signe de $\bar{b}_L * \bar{n}$	Directions des segments	[Terentyev *et al.* 2008a]
S_{00}		$\bar{b}_L * \bar{n} = 0$	$< 100 >$	C6
S_{01}		$\bar{b}_L * \bar{n} = 0$	$< 110 >$	C1
S_{+0}		$\bar{b}_L * \bar{n} > 0$	$< 100 >$	C4
S_{+1}		$\bar{b}_L * \bar{n} > 0$	$< 110 >$	C2
S_{-0}		$\bar{b}_L * \bar{n} < 0$	$< 100 >$	C5
S_{-1}		$\bar{b}_L * \bar{n} < 0$	$< 110 >$	C3

Tableau 2.1 Nouvelle classification proposée pour les six configurations testées dans [Terentyev *et al.* 2008a].

Les images des simulations sont obtenues par le code de visualisation Paraview [Squillacote 2008] dans notre étude. Ci-dessous (Figure 2.14) est un exemple d'une interaction entre une dislocation coin et une boucle :

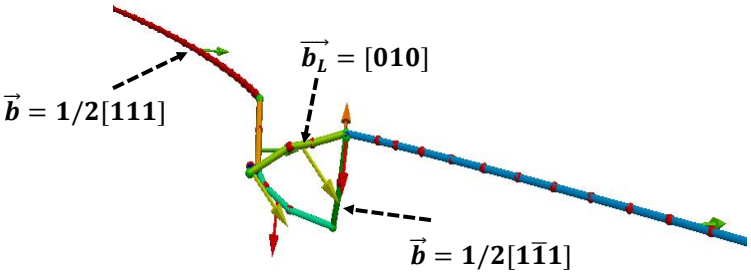


Figure 2.14 Présentation d'une image d'interaction entre une dislocation coin de vecteur de Burgers $\vec{b} = 1/2[111]$ et une boucle de vecteur de Burgers $\overrightarrow{b_L} = [010]$ dans le Paraview

Les flèches de différentes couleurs présentent les différents vecteurs de Burgers dédiés à leur propre segment qui est connecté par deux nœuds physiques de couleur verte (les nœuds de topologie sont en rouge) à ses deux extrémités. La différence de couleur entre segments est juste une manière de mieux les différencier visuellement.

2.4 Identification des paramètres rayon de cœur 'a' et tension de cœur 'α_{core}'

Comme nous l'avons présenté dans la partie de ce chapitre consacrée au calcul des forces (Section 2.2.2.2), deux paramètres caractéristiques du cœur des dislocations sont introduits dans nos équations : le paramètre de rayon de cœur ou de régularisation 'a' qui intervient dans le modèle de champ élastique non-divergent des dislocations de Cai [Cai *et al.*2006] et le paramètre de tension de cœur 'α_{core}' [Hull *et al.* 2001]. Nous discutons ici le choix de ces paramètres dans le cadre de notre étude. Il faut noter que cette analyse est originale et qu'il est surprenant qu'aucune étude de ce type n'ait été réalisée par les utilisateurs de la théorie non-singulière des dislocations avant cette thèse sauf pour les matériaux FCC [Martinez *et al.* 2008].

Notons d'emblée une similarité forte de ces deux termes heuristiques dans la mesure où ils jouent tous les deux sur l'énergie par unité de longueur des dislocations. Ainsi, la diminution du paramètre 'a' comme l'augmentation du paramètre 'α_{core}' conduit à une augmentation de cette énergie linéique, et donc à une augmentation de la rigidité des dislocations[2]. En jouant simultanément sur les paramètres 'a' et 'α_{core}', on vérifie par exemple que l'on peut obtenir une même mesure de la contrainte d'activation d'une source de Frank-Read (voir Figure 2.15) pour différents couples de valeurs (a;α_{core}). Si nous comparons, sur cette même figure, nos résultats à la formule proposée par Foreman [Foreman 1967] qui sert habituellement à calibrer les codes de DD, nous obtenons ainsi une première équation pour choisir un couple approprié de valeurs pour 'a' et 'α_{core}'.

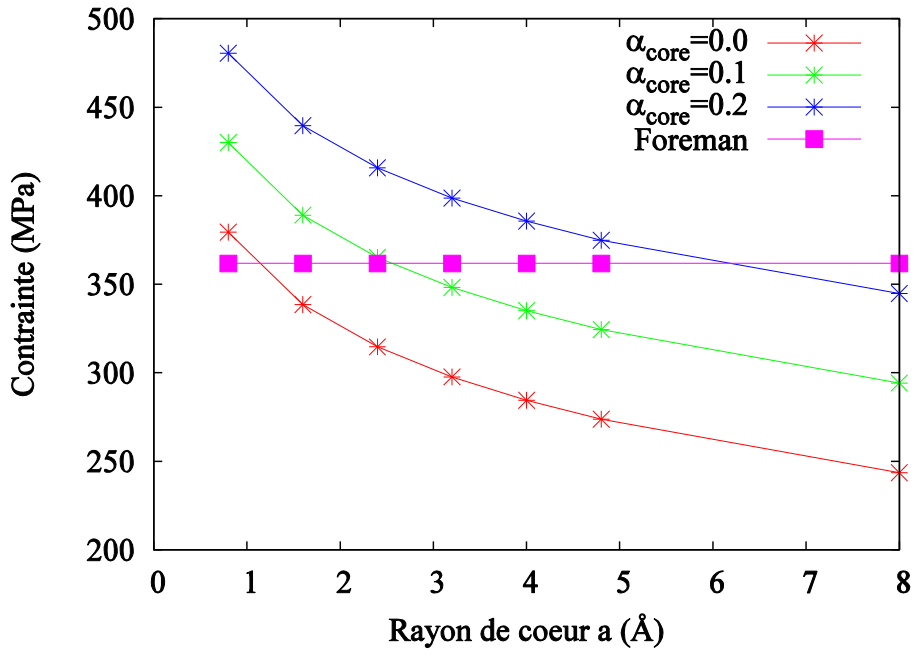


Figure 2.15 Contrainte d'activation obtenue en variant la valeur 'a' et 'α_{core}': une source de Frank-Read initialement coin avec une longueur de 42 nm.

[2] Nous n'utilisons ici volontairement pas le terme de tension de ligne qui, bien qu'apparenté à notre discussion, désigne une approximation particulière de la théorie classique des dislocations [De Wit *et al*, 1959].

L'étude de l'équilibre ou de la contrainte d'activation d'une source de Frank-Read ne permet cependant pas d'identifier de manière unique les deux paramètres (a; α_{core}). Il faut alors chercher un phénomène physique exacerbant la différence entre les deux paramètres. Une telle situation est offerte par l'équilibre des forces s'exerçant sur un nœud physique multiple. Dans le cadre d'une description nodale, la force résultant $\overline{F_l}$ sur le nœud physique est la somme des forces exercées sur ce nœud par l'intermédiaire de l'ensemble de ses connections.

$$\overline{F_l} = \sum_{segment\ j\ reliés\ au\ noeuds\ l} \overline{F_l^j} \tag{28}$$

Dans le cas d'une énergie de cœur, cette force est en première approximation la somme de *forces tangentes* à chacune de ses connexions (Figure 2.16-a) comme l'indique l'équation (8). Au contraire, dans le cas d'un formalisme élastique non-divergent, cette force est la somme de *forces normales* à chacune de ses connexions (Figure 2.16-b) dans la mesure où elles dérivent individuellement de la force élastique de Peach-Koehler. Nous aboutissons donc, en comparaison au cas de l'approximation de la tension de ligne sur un élément de dislocation *dl*, à une situation où ces deux approches diffèrent totalement.

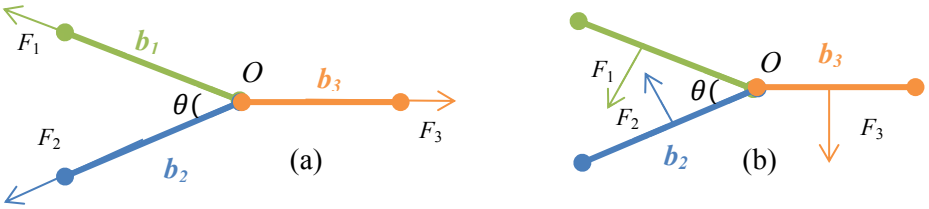


Figure 2.16. (a) Les forces de tension de ligne (b) Les forces normales aux segments de Peach-Koehler

Des simulations de DM d'équilibre de nœuds triples pourraient apporter des éléments de réponse et mériteraient d'être réalisées. En l'absence de données exploitables de ce type pour notre matériau, de façon heuristique, nos calculs d'interactions dislocation-boucle suggèrent fortement que les *deux formalismes doivent coexister* : une énergie de cœur d'origine non-élastique (via un paramètre 'α_{core}' non nul) et un formalisme non-singulier (via le paramètre 'a'). Notons au passage que, dans le livre de Bulatov *et al.* [Bulatov *et al.* 2006] et l'article de référence du code Paradis [Arsenlis *et al.* 2007], la coexistence de ces deux formalismes est également proposée.

En l'absence d'élément supplémentaire, nous avons effectué des simulations d'interactions entre une dislocation « coin » et une boucle de type $S_{+0}U$ (ou C4U [Terentyev *et al.* 2008a]) en choisissant trois séries de couple ('a'=1.4 et 'α_{core}'=0.03, 'a'=2.4 et 'α_{core}'=0.1, 'a'=4 et 'α_{core}'=0.15) qui donnent, dans le cas de la source de Frank-Read, les mêmes contraintes critiques que le calcul de Foreman. Les courbes obtenues sont représentées sur la Figure 2.17 :

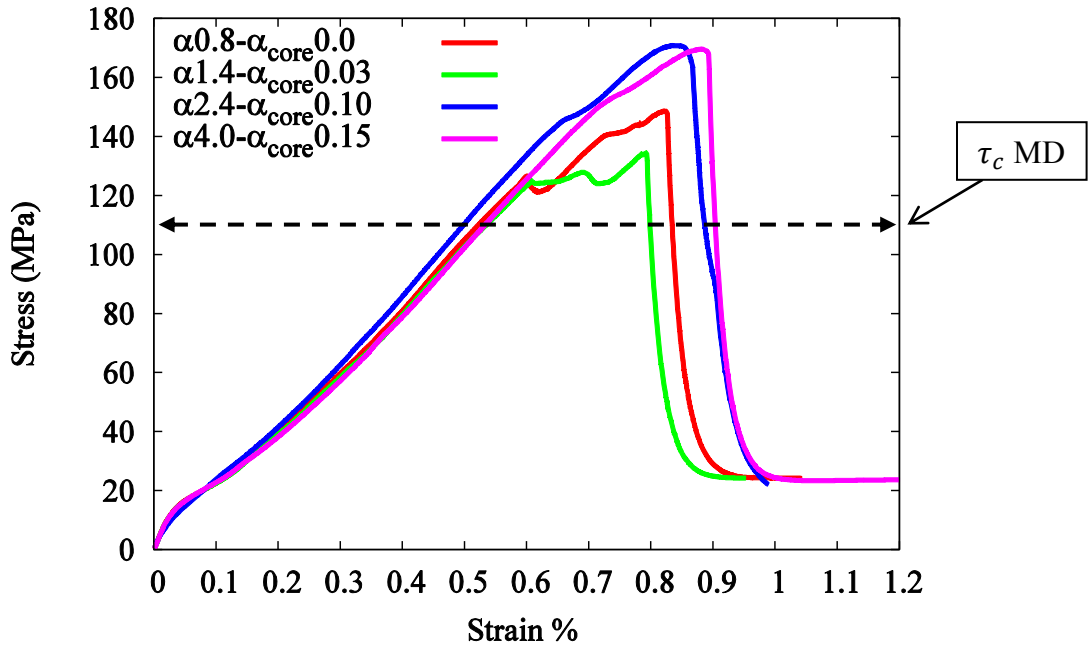


Figure 2.17 Courbes contrainte-déformation pour la configuration $S_{+0}U$ (C4U) réalisées en utilisant trois couples de valeurs (‘a’(Å)- ‘α_{core}’), τ_c MD présente la contrainte critique obtenue en DM [Terentyev *et al.* 2008a]

La comparaison des trois séries de courbes (Figure 2.17) avec les résultats de DM [Terentyev *et al.* 2008a] nous conduit à retenir le couple ‘a =1.4 – α_{core} = 0.03’, les deux autres séries de valeurs conduisant en effet à une surestimation des contraintes critiques par rapport aux valeurs obtenues en DM.

Bibliographie

[Arsenlis *et al.* 2002] A. Arsenlis, M. Rhee, G. Hommes, R. Cook, J. Marian, Acta Materialia 60 (2012) 3748

[Bacon *et al.* 2006] D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, Z. Rong, Philos. Mag. 86 (2006) 3921

[Blin 1955] J. Blin, Acta Met. 3 (1955) 199

[Brown 1964] L. Brown, The self-stress of dislocations and the shape of extended nodes. Phil. Mag. 10 (1964) 441

[Bulatov *et al.* 2001] V.V. Bulatov, M. Rhee, W. Cai, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 653 (2001) Z1.3.1

[Bulatov *et al.* 2004] V.V. Bulatov, W. Cai, J. Fier, M. Hiratani, T. Pierce, M. Tang, M. Rhee,K. Yates, T. Arsenlis, dans SperComputing 2004, « Scalable line dynamics in paradis » (2004)

[Bulatov *et al.* 2006] V.V. Bulatov, W. Cai, *Computer Simulations of Dislocations*. Oxford University Press. (2006)

[Cai *et al.* 2006] Wei Cai, A. Arsenlis, C.R. Weinberger, V.V. Bulatov, J. Mech. Phys. Sol. 54 (2006) 561

[Canova *et al.* 1991] G.R. Canova, L.P. Kubin, Dislocation microstructures and plastic flow: a three dimensional simulation, Continuum models and discrete systems, ed. by G.A. Maugin, 1991

[Chaussidon *et al.* 2006] J. Chaussidon, M. Fivel, D. Rodney, Acta Mater. 54 (2006) 3407

[Chaussidon *et al.* 2010] J. Chaussidon, C. Robertson, M. Fivel, B. Marini, Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering 18(2) (2010) 025003

[Clouet 2009] E. Clouet, Philos. Mag. 89 (2009) 1565

[Devincre *et al.* 1992] B. Devincre, M. Condat, Acta Metall. 40 (1992) 2629

[Devincre 1994] B. Devincre, Thèse de Doctorat de l'Université d'Orsay (1994)

[Devincre 1996] B. Devincre, dans « Computer Simulation in Materials Science », ed: H.O. Kirchner, V. Pontikis, L. P. Kubin, Kluwer Academic Publishers, Amsterdam, North-Holland, 309 (1996)

[Devincre *et al.* 2001] B. Devincre, L. P. Kubin, C. Lemarchand, R. Madec, Mater. Sci. Eng. A, 309 (2001) 211

[De Wit *et al.* 1959] G. de Wit, J.S. Koehler. Phys. Rev. 116 (1959) 1113

[Domain *et al.* 2005] C. Domain, G. Monnet, Phys. Rev. Lett. 95 (2005) 215506

[Dupuy *et al.* 2002] L. Dupuy, M.C. Fivel, Acta Materialia 50 (2002) 4873

[Fivel *et al.* 1997] M. Fivel, M. Verdier, G.R. Canova, Mater. Sci. Eng. A234-236 (1997) 923

[Foreman *et al.* 1966] A.J.E. Foreman, M.J. Makin, Philos. Mag. 14 (1966) 911

[Foreman 1967] A.J.E. Foreman, Philos. Mag. 15 (1967) 1011

[Ghoniem *et al.* 1997] N.M. Ghoniem, M. Bacaloni, Eng. Rept Ucla/Matmod, 1 (1997)

[Ghoniem *et al.* 1988] N.M. Ghoniem, R.J. Amodeo, Res. Mech. 23 (1988) 137

[Harry *et al.* 2002a]T. Harry, D.J. Bacon, Acta Mater. 50 (2002) 195

[Harry *et al.* 2002b]T. Harry, D.J. Bacon, Acta Mater. 50 (2002) 209

[Hirth *et al.* 1996] J.P. Hirth, M. Rhee, H. M. Zbib, J. Comp. Mater. Design 3 (1996) 164

[Hull *et al.* 2001] D. Hull, D.J. Bacon, *Introduction to dislocations* (Vol. 257). Oxford: Pergamon Press. (2001)

[Keh *et al.*1967] A. S. Keh, Y. Nakada, Can. J. Phys. 45 (1967) 1101

[Kubin *et al.* 1992] L.P. Kubin, G.R. Canova, M. Condat, B. Devincre, V. Pontikis, Y. Bréchet, Sol. Stat. Phenom., 23 et 24 (1992) 455

[Kubin 2013] L.P. Kubin, *Dislocations, mesoscale simulations and plastic flow*. Oxford University Press. (2013)

[Madec *et al.* 2002] R. Madec, B. Devincre, L.P. Kubin, Comp. Mat. Sci. 23 (2002) 219

[Martinez *et al.* 2008] E. Martinez, J. Marian, A. Arsenlis, M. Victoria, J.M. Perlado, Journal of the Mechanics and Physics of Solids 56 (2008) 869

[Monnet 2006] G. Monnet, Phil. Mag. 86 (2006) 5925

[Monnet *et al*. 2009] G. Monnet, D. Terentyev, Acta Materialia, 57 (2009) 1416

[Monnet *et al.* 2013] G. Monnet, L. Vincent, B. Devincre, Acta Materialia 61 (2013) 6178

[Mohles 2001] V. Mohles, Phil. Mag. A 81(4) (2001) 971

[Mura 1982] T. Mura, Micromechanics of Defects in Solids. Kluwer, Dordrecht

[Naamane 2008] S. Naamane, Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie (2008)

[Nabarro 1967] F.R.N. Nabarro, Proc. Phys. Soc. 59 (1947) 256

[Nabarro 1967] F.R.N. Nabarro, The Theory of Crystal Dislocations (Vol. 257). Oxford University Press. (1967)

[Nogaret *et al.* 2008] T. Nogaret, D. Rodney, Fivel M, C. Robertson, J. Nucl. Mater. 380 (2008) 22

[Lépinoux et *al.* 1987] J. Lépinoux, L.P. Kubin, Scripta MET 21 (1987) 833

[LeSar 2004] R.LeSar, Phys. Stat. Sol. (b) 241 (2004) 2875

[Queyreau 2008] S. Queyreau, Thèse de Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie (2008)

[Queyreau *et al.* 2011] S. Queyreau, J. Marian, M.R. Gilbert, B.D. Wirth, Physical Review B 84 (2011) 064106

[Saai 2008] A. Saai, Rapport de thèse de l'Université de Savoie (2008)

[Schwartz 1997] K.W. Schwartz, Phys. Rev. Lett, 38 (1997) 4785

[Shin *et al.* 2005] C.S. Shin, M. C. Fivel, M. Verdier, C. Robertson, Mat. Sci. Eng. A400-401 (2005) 166

[Tang *et al.*1988] M. Tang, L. P. Kubin, G. R. Canova, Acta Mater. 46 (1998) 3221

[Terentyev *et al.* 2007] D. Terentyev, D. Malerba, D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, Journal of Physics: Condensed Matter, 19 (2007) 45

[Terentyev *et al.* 2008a] D. Terentyev, P. Grammatikopoulos, D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, Acta Materialia, 56 (2008) 5034

[Terentyev *et al.* 2008b] D. Terentyev, D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, J. Phys: Condens. Matter. 20 (2008) 445007

[Terentyev *et al.* 2010] D. Terentyev, Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, Acta Materialia, 58 (2010) 2477

[Weygand 2003] D. Weygand, dans « Proc. IUTAM Symposium, Osaka, Japan» 23 (2003)

[Zbib *et al.* 2000] H.M. Zbib, T. Diaz de la Rubia, M. Rhee, J. P. Hirth, J. Nuc. Mater. 276 (2000) 154

Chapitre 3 : Identification des paramètres du modèle de DD

Table des matières

Introduction **67**

3.1 La mobilité et la contrainte de seuil en littérature **67**

3.2 Interaction entre une dislocation coin et les boucles de type <100> **72**

3.3 Interactions de contact avec des boucles de vecteur de burgers ½< 111 > **86**

3.3.1 Hypothèses de calcul 86

3.3.2 Résultats de simulation 88

3.4 Interaction à longue distance avec des boucles de vecteur de burgers ½<111> **95**

Conclusion **100**

Bibliogrphie **102**

Introduction:

Dans ce chapitre, nous allons identifier les deux paramètres libres de la loi de mobilité visqueuse, à savoir les coefficients de viscosité B et les contraintes de friction τ_0 pour chaque système de glissement du fer α. Une recherche bibliographique est tout d'abord menée afin d'établir un jeu de départ ainsi qu'un domaine de variation physiquement admissible pour les valeurs de ces paramètres. Ensuite, une comparaison directe avec des simulations élémentaires en DM nous permet d'ajuster plus finement ces valeurs.

Deux types d'interaction à courte distance entre une dislocation coin et une boucle d'irradiation sont simulées et présentées dans ce chapitre : le premier type concerne les interactions entre une dislocation coin et des boucles carrées de type <100>, tandis que le deuxième type concerne les interactions entre une dislocation coin et des boucles hexagonale de vecteur de burgers ½[1$\bar{1}$1].

L'identification des paramètres B et τ_0 porte sur une comparaison à la fois qualitative et quantitative entre les résultats de simulations obtenus en DD et ceux obtenus en DM. Du point de vue qualitatif, on vérifie notamment que le jeu de paramètres retenu permet aux simulations de DD de reproduire les mêmes mécanismes que ceux observés en DM au cours des interactions entre dislocation et boucles. Du point de vue quantitatif, on cherche à minimiser l'écart entre les niveaux de contraintes critiques obtenus avec les deux codes pour décrocher une dislocation des boucles sur lesquelles elle était ancrée.

3.1 La mobilité et la contrainte de seuil en littérature

Dans le chapitre précédent, nous avons déjà indiqué que la loi de mobilité utilisée pour ce travail était une loi visqueuse linéaire à seuil, que l'on peut formuler de la manière suivante :

$$v^s = \frac{< \left|\tau^s_{eff}\right| - \tau^s_0 >* b}{B^s} sign\left(\tau^s_{eff}\right) \tag{29}$$

avec v^s, la vitesse de la dislocation, τ^s_{eff} la cission effective, τ^s_0 la contrainte seuil ou contrainte de friction de réseau sur le système s, b la norme du vecteur de Burgers, B^s le coefficient de viscosité sur le système s. Les crochets représentent les crochets de McCauley, $< u >= u$ si $u > 0$, et $< u >= 0$ sinon.

Même si cette loi est utilisée classiquement dans les codes de DD [Devincre 1994, Rhee *et al.* 1998, Madec *et al.* 2003, Queyreau 2008], il n'existe pas encore de consensus quant au choix des valeurs des paramètres τ^s_0 et B^s pour le fer pur ni sur le nombre de systèmes devant être considérés comme actifs.

Une analyse de nos premiers résultats de simulation (voir plus loin) montre ainsi que pour être en mesure de reproduire les mécanismes d'interactions dislocation-boucle dans le fer, il faut activer la mobilité des dislocations de vecteurs de Burgers ½<111> glissant dans des plans {110}, {112} et {123}, ce qui est assez classique, mais également activer la mobilité des dislocations de Burgers <100> glissant dans des plans de type {110} et {100}, ce qui l'est déjà moins.

Nos premiers résultats de simulation nous ont par ailleurs permis de constater que la valeur des coefficients τ_0^s et B^s influait de manière significative le déroulement des réactions entre une dislocation et des boucles d'irradiation.

Une première analyse bibliographique des résultats de DM disponibles pour le fer indique clairement que les coefficients de viscosité dépendent du potentiel interatomique utilisé pour obtenir ces calculs. Il faut donc, lorsqu'on souhaite comparer un résultat de DD à un résultat de DM, utiliser des coefficients de viscosité obtenus pour le même potentiel interatomique. Trois potentiels sont principalement utilisés dans la littérature. On va donc se référer à chacun de ces potentiels via la convention suivante :

Potentiel P97: [Ackland *et al.* 1997]

Potentiel P03: [Mendelev *et al.* 2003]

Potentiel P04: [Ackland *et al.* 2004]

Nous regroupons dans les tableaux suivants les données extraites de la littérature avec ces potentiels:

1. Vecteur de Burgers ½ <111> et plans {110} :

Tableau 3.1 Valeurs des coefficients de viscosité et de friction de réseau obtenues par simulation en DM ou mesurées expérimentalement pour des dislocations coin de vecteur de Burgers ½ <111> glissant dans des plans {110}

Potentiel	τ_pPeierls (MPa) (T=0K)	τ_0(MPa) (T>=300k)	Viscosité B (10^{-5} Pa*s)	Références
P97	25	~10	2,5	[Osetsky *et al.* 2003]
P03	--	--	5,2	[Kuksin *et al.* 2013]
P03	--	~ 0	18	[Queyreau *et al.* 2011]
P04	90	~10	7,5	[Terentyev *et al.* 2008a, 2007]
Expérience	--	--	34	[Urabe *et al.* 1975]

Pour les dislocations coins, les mesures expérimentales donnent des coefficients de viscosité beaucoup plus grands que les résultats de DM. Dans sa thèse, Rodriguez [Rodriguez 2011] considère que des mécanismes non pris en compte ici tels que l'influence des impuretés sont à l'origine de cette différence, et il a alors choisi d'utiliser la valeur expérimentale d'Urabe et Weertman. Dans la thèse de Queyreau [Queyreau 2008], une valeur de 10.10^{-5} Pa*s est choisie pour le coefficient 'B' et une valeur de 30MPa pour la contrainte de friction. On note également que la mesure du coefficient de viscosité varie pour un même potentiel, selon l'étude réalisée, ce qu'il est possible d'attribuer aux conditions aux limites utilisées ou à la taille du système considéré.

L'analyse du Tableau 3.1 indique qu'une valeur réaliste pour le coefficient de viscosité $B^{\{110\}}$ se situe entre 2,5 et 30.10^{-5} Pa*s, tandis que la friction de réseau $\tau_0^{\{110\}}$ doit être de l'ordre de 10MPa.

2. Vecteur de Burgers ½ <111> et plans {112} :

On reporte dans le Tableau 3.2 les valeurs des coefficients de viscosité et de friction de réseau relevés dans la littérature pour les dislocations coins de vecteur de Burgers ½ <111> glissant dans des plans {112}.

Tableau 3.2 Valeurs des coefficients de viscosité et de friction de réseau obtenues par simulation en DM pour des dislocations coin de vecteur de Burgers ½ <111> glissant dans des plans {112}

Potentiel	τ_pPeierls (MPa) (T=0K)	τ_0 (MPa) (T>=300k)	La viscosité B (10^{-5} Pa*s)	Références
P04	640(TD) 700(AD)	<15	3	[Monnet *et al.* 2009]
P03	260(TD) 510(AD)	~10	9.4	[Queyreau *et al.* 2011]

Il est important de noter qu'à basse température, le mouvement des dislocations est plus difficile dans les plans {112} que dans les plans {110}. En augmentant la température, cette différence devient de plus en plus faible, et à haute température (cas du Tableau 3.2), la mobilité est presque identique sur ces deux familles de plans. Il est toutefois surprenant de noter que la valeur de viscosité dans les plans {112} est égale à la moitié de celle des plans {110} à haute température dans l'article de [Queyreau *et al.* 2011].

3. Vecteur de Burgers ½ <111> et plans {123} :

Ce système est régulièrement cité comme étant actif dans différents ouvrages de référence [Jaoul 1965]. Nous n'avons cependant pas trouvé assez de données pour pouvoir estimer un coefficient de viscosité pour ce système. Dans une étude publiée en 2006 [Watanabe 2006] basée sur un potentiel plus ancien que les trois précédents, l'auteur avait estimé que l'énergie nécessaire pour activer le glissement dans les plans {123} était 1,3 fois plus élevée que pour les plans {112} et 3,5 fois plus élevée que pour les plans {110}. Dans une étude récente [Terentyev *et al.* 2014 soumise], les auteurs ont étudié la mobilité d'une dislocation coin dans ce plan et ont trouvé qu'elle était similaire à celle du système ½<111>{110}.

4. Vecteur de Burgers <100> et plans {110} :

On reporte dans le Tableau 3.3 les valeurs des coefficients de viscosité et de friction de réseau relevés dans la littérature pour les dislocations coins de vecteur de Burgers <100> glissant dans des plans {110}.

Tableau 3.3 Valeurs des coefficients de viscosité et de friction de réseau obtenues par simulation en DM pour des dislocations coin de vecteur de Burgers <100> glissant dans des plans {110}

Potentiel	τ_pPeierls (MPa) (T=0K)	τ_0 (MPa) (T>=300k)	La viscosité B (10^{-5} Pa*s)	Références
P03	1500	~10	80	[Terentyev *et al.* 2010a, 2012]

A basse température, la mobilité est beaucoup plus difficile que pour le système de référence ½ <111> {110}. Toutefois, cette différence se réduit en augmentant la température et, dans notre cas d'étude qui se situe à haute température, ces systèmes ont des mobilités relativement proches [D. Terentyev *et al.* 2010a, 2012].

5. Vecteur de Burgers <100> plans {100} :

Ce système n'est pas connu, ni expérimentalement ni en DM, pour être un système glissile dans le fer. Nos calculs d'interaction dislocation-boucle avec des boucles de type <100> indiquent cependant que, considérer ce système comme étant totalement sessile, conduit à des résultats en contradiction avec la DM, la dislocation mobile cisaillant simplement la boucle comme indiqué dans la (Figure 3.1).

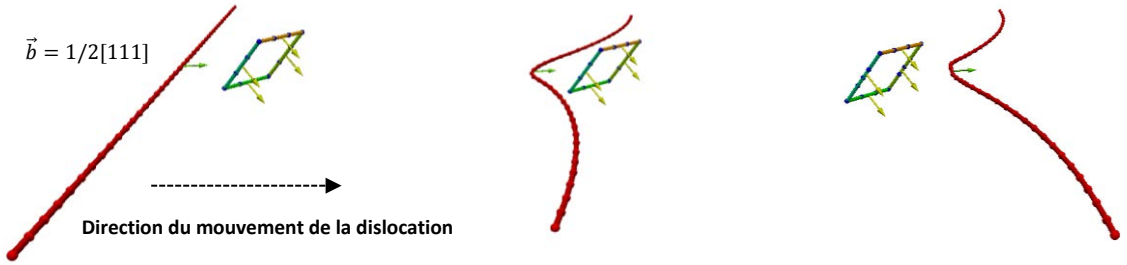


Figure 3.1 Phénomène de cisaillement en DD sans mobilité du système {100}

L'introduction d'une mobilité, même réduite, permet inversement de reproduire dans son intégralité, l'interaction obtenue par dynamique moléculaire (voir Figure 3.2). En l'absence de données quantitatives et compte-tenu du caractère malgré tout peu glissile de ce système, nous avons fait le choix de prendre une viscosité de 9000.10^{-5}Pa*s afin de reproduire au mieux les résultats de DM. Les détails de ces simulations seront présentés plus loin dans ce chapitre.

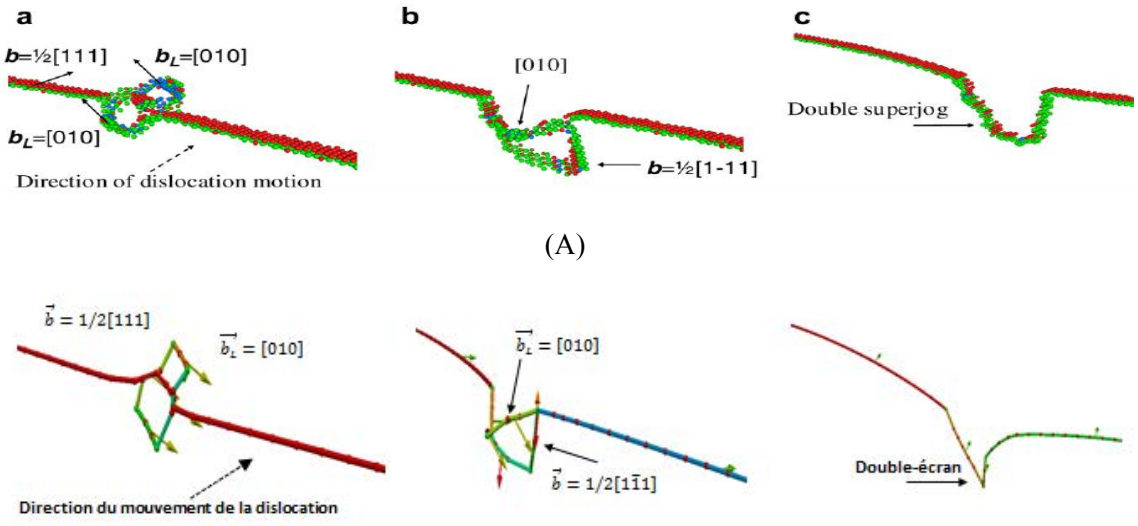


Figure 3.2 Les principales étapes de la réaction entre une dislocation coin et une boucle {100}. (A) Résultats de simulation en DM [Terentyev *et al.* 2008b] (B) Résultats de simulation en DD avec une mobilité B=9000.10^{-5} Pa*s pour les systèmes <100>{100}

En guise de conclusion pour cette partie, nous présentons dans le Tableau 3.4 la liste des coefficients de viscosité et de friction de réseau retenus pour les différents systèmes de glissement dans NUMODIS afin de reproduire qualitativement les résultats de DM utilisant le potentiel P04. Il est à noter que P03 et P04 sont extrêmement proches du point de vue des propriétés thermodynamiques (Willaime, E. Clouet, D. Terentyev [Communication privée]). La principale pathologie du P03 est un coefficient d'expansion thermique négatif, d'où le développement de la version P04 qui corrige le problème, la mobilité des dislocations « coin » devant être similaire.

Tableau 3.4 : Jeu de valeurs de mobilité et de friction de réseau déduit de l'analyse de la littérature pour le potentiel P04

Burgers	Plans	B (10^{-5} Pa*s)	τ_0 (MPa)
½ <111>	{110}	$\in [2{,}5; 30]$	≈10
½ <111>	{112}	$\approx B^{<111>\{110\}}$	$\approx \tau_0^{<111>\{110\}}$
½ <111>	{123}	$\approx B^{<111>\{110\}}$	$\approx \tau_0^{<111>\{110\}}$
<100>	{110}	80	≈10
<100>	{100}	9000	>>10

Les données présentées dans le Tableau 3.4 constituent le jeu de valeur initiale d'un processus d'identification quantitatif qui s'appuie sur la comparaison entre les valeurs de contrainte critique obtenues en DM et en DD pour décrocher une dislocation coin de boucles d'irradiation de type <100>.

3.2 Interaction entre une dislocation coin et les boucles de type <100>

Dans cette partie, nous allons vous présenter les résultats de simulations élémentaires effectués avec le code de DD NUMODIS entre une dislocation coin et différentes boucles d'irradiation de type <100>.

Ces simulations ont pour objectif de reproduire le plus fidèlement possible les résultats de simulations atomiques (DM) obtenus dans les mêmes configurations, ceci afin de valider les capacités du code de DD NUMODIS à représenter les interactions élémentaires physiquement fondées entre dislocations et boucles. Pour chaque cas de simulation, les paramètres principaux des simulations de DM (dimensions des boites de simulation, densité et taille des boucles, distance initiale entre dislocation et boucles, vitesse de déformation, conditions aux limites périodiques, …) sont repris dans les calculs de DD. Au-delà de la simple vérification que les mécanismes d'interaction obtenus en DD sont similaires à ceux observés en DM, une identification quantitative des paramètres de viscosité et de friction de réseau présentés dans le Tableau 3.4 est réalisée en minimisant l'écart entre les cissions critiques obtenues en DM et en DD pour décrocher une dislocation coin des boucles d'irradiation.

Ce travail est décrit dans un article [Shi *et al.* 2014] qui a été soumis à « Journal of Nuclear Materials » et qui est présenté ci-dessous.

Interaction of <100> dislocation loops with dislocations studied by dislocation dynamics in α-iron

X.J. SHI[1], L. DUPUY[1], B. DEVINCRE[2], D. TERENTYEV[3], L. VINCENT[1]

[1] *CEA, DEN, SRMA, F-91191 Gif-sur-Yvette, France*

[2] *Laboratoire d'Etude des Microstructures, CNRS-ONERA, 29 av. de la Division Leclerc, 92322 Châtillon Cedex, France*

[3] *SCK-CEN, Nuclear Materials Science Institute, Boeretang 200, B-2400 Mol, Belgium*

Abstract

Interstitial dislocation loops with Burgers vector of <100> type are formed in α-iron under neutron or heavy ion irradiation. As the density and size of these loops increase with radiation dose and temperature, these defects are thought to play a key role in hardening and subsequent embrittlement of iron-based steels. The aim of the present work is to study the pinning strength of the loops on mobile dislocations. Prior to run massive Dislocation Dynamics (DD) simulations involving experimentally representative array of radiation defects and dislocations, the DD code and its parameterization are validated by comparing the individual loop-dislocation reactions with those obtained from direct atomistic Molecular Dynamics (MD) simulations. Several loop-dislocation reaction mechanisms are successfully reproduced as well as the values of the unpinning stress to detach mobile dislocations from the defects.

Keywords: Dislocation Dynamics; Molecular Dynamics; Edge dislocation; Interstitial dislocation loop; α-iron; Irradiation

1 Introduction

In nuclear Pressurized Water Reactors (PWR), special attention is paid to the hardening and embrittlement processes existing in the low-alloyed α-iron steel that constitutes the pressure vessels. The latter structural component, which cannot be replaced, is indeed an essential barrier between the fissile fuel and the environment. Hence, a better understanding of the mechanical properties of irradiated α-iron is critical before considering possible lifetime extension of the nuclear reactors.

During exposure to fast-neutron irradiation, point defects are created in displacement cascades and a high proportion of them regroup in clusters [1]. Molecular Dynamics (MD) simulations have shown that some part of these defects, the self-Interstitial atoms (SIAs) form platelets of closely packed parallel crowdions that are equivalent to nanometer-scale interstitial dislocation loops with Burgers vector ***b*** parallel to the crowdion axis [2][3][4]. In addition, MD simulations suggested that these SIA loops can move in the direction parallel to the crowdion axis with rather low activation energy [2]. Therefore, SIA loops are thought to be elements contributing to the hardening process observed in irradiated material, i) either as a source of internal stresses opposed to dislocation mobility or ii) as a source of additional contact reactions pinning mobile dislocations and increasing the forest strengthening [5][6][7][8][9][10].

Even though MD simulations provide basic and necessary information about the interactions between SIA loops and mobile dislocation, they have important time scale limitations preventing a direct extrapolation of their results at the macroscopic scale. Then, a multi-scale modeling strategy must be elaborated to develop constitutive plastic laws with longer-term prediction capability [11]. In the past years, Dislocation Dynamics (DD) simulations proved to be an effective method to proceed with this up-scaling task. DD simulations are based on the elastic dislocation theory and can capture the most important features observed at the atomic scale [10][20][13]. Furthermore, they can simulate plastic deformation in large micrometric volume elements to investigate the collective properties of microstructures made of many dislocations [14][15][16]. In practice, DD simulations provide an enhancement of more than a thousand times in terms of size and timescale when compared to MD simulations.

Yet, DD simulations require the definition of "local rules" to account for the dislocation core properties which cannot be replicated with the elastic theory in the same way as it occurs in atomistic simulations. For instance, in the present study one needs to identify and justify a set of DD simulation parameters defining the reactions that take place when a mobile dislocation contacts an SIA loop. Hence, prior to run massive DD simulations dedicated to realistic microstructures with a large density of SIA loops, the parameters controlling the loop-dislocation reactions in the DD simulation must be validated. The identification of these rules for <100> dislocation loops is the aim of the present paper.

Several MD studies addressing the interaction of mobile dislocations with ½<111> loops were published in the past years [5][7][17][18], but not so many for the more complex interaction involving <100> loops [5]. However, at the PWR relevant temperature range mainly <100> loops are formed under neutron-irradiation [19]. Consequently, in the present paper we restricted our investigations to the most critical MD results reported in [5]. The goal is to achieve the

parameterization allowing one to reproduce both the interaction mechanisms and critical resolved shear stress as obtained from MD simulations.

The paper is organized as follows. Firstly, the DD simulation model and computational scheme is briefly presented. The results of the DD simulation results are then reported and systematically compared with the relevant MD results. Finally, the critical DD parameters controlling the loop-dislocation interaction are identified and discussed.

2 The DD simulation model

The DD simulation code NUMODIS (e.g. [20]) was used in the present study. This code is similar in many aspects to the PARADIS code [21][22]. It uses a nodal representation to discretize the dislocation lines into a series of inter-connected linear segments. The computation of the internal elastic stress field and corresponding nodal forces, is based on the non-singular continuum elastic theory of dislocations proposed by Cai et al. [23]. It should be mentioned that particular attention was paid to the proper handling of the numerous topological changes that occur when dislocations interact with complex objects such as dislocation loops.

In order to compare the results of MD and DD simulations, the simulation conditions defined in reference [5] (including the initial, the loading and the boundary conditions) were systematically reproduced with the DD simulations. As illustrated in Fig. 1, the simulated crystal orientation is such that its three axes X, Y and Z are parallel to the [111], $[\bar{1}\bar{1}2]$ and $[1\bar{1}0]$ directions, respectively. Also, the dimensions of the DD simulated volume correspond to the volume used in [5], i.e. $L_X = 30nm$, $L_Y = 41nm$ and $L_Z = 20nm$.

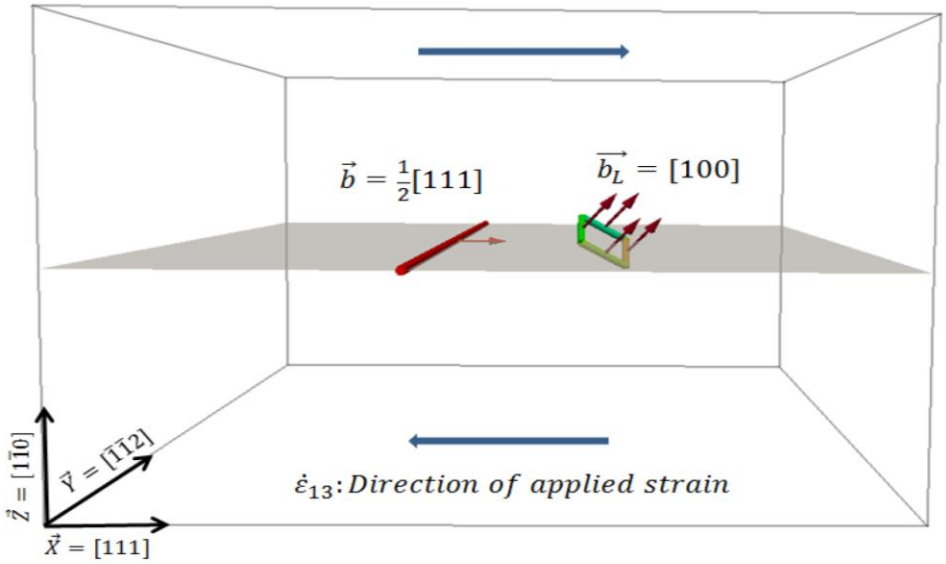
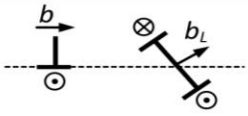
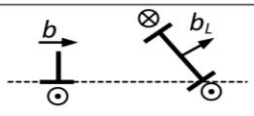
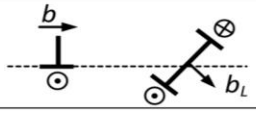


Fig. 1: Schematic illustration of the simulation condition. The dark plan here presents the main glide plan for the dislocation which lies along the direction of Y axis, and arrows touched with dislocation lines present their Burgers vectors. Two blue arrows indicate the direction of applied shear strain.

An edge dislocation with burgers vector ½ [111] and glide plane $(1\bar{1}0)$ is initially set at the center of the simulation cell. A squared SIA loop (with a side of 2.6 nm length) with Burgers vector <100> is then positioned in front of the line at a distance of 5 nm. In accordance with the calculations reported in [5], different configurations of SIA loop have been tested. For the sake of consistency, the nomenclature for the interaction geometry defined in [5] was used in the following. Those configurations are listed in Table 1.

Table 1: Definition of the SIA loop configurations considered in the simulations: The first column gives the name for the specific interaction geometry, the second one contains a schematic description of the edge dislocation – SIA loop interaction, the third and fourth ones denote the Burgers vector of a square loop and orientation of its sides, respectively.

Configuration name	**Schematic**	***SIA Loop Burgers vector direction***	**Side directions of the SIA loop**
S_{+1}		[100]	$[01\bar{1}]$ [011]
$S_{+0}U$		[100]	[001] [010]
S_{-0}		[010]	[100] [001]

Periodic boundary conditions were applied along the X and Y directions as in [5]. In agreement with a previous analysis made in [24], the dimension of the simulated volume in the glide direction (X) was considered large enough to neglect the long-range interactions with the image dislocations associated to the use of periodic boundary conditions. Tests have been made to verify the validity of such simplification.

Acknowledging that little is known about the dislocation mobility in the numerous slip systems observed in α-iron at high temperatures, we used simple linear over-damped viscous laws with the form:

$$v^s = \frac{<\tau_{eff} - \tau_0^s> b}{B^s} \quad (1)$$

Where <.> are the McCauley brackets (<u>= u, if $u > 0$ and <u>=0 otherwise, b is the dislocation burgers vector, τ_{eff} is the effective resolved shear stress calculated at the integration points along the dislocation lines [25], τ_0^s is a constant friction stress which means that the dislocation will move only when $\tau_{\text{eff}} > \tau_0^s$. B^s is a viscous coefficient whose value is function of the dislocation systems 's'. As little exact and consistent information can be found in the literature to identify the B^s and τ_0^s values [24][26][27][28][29][30][31][32][33][34], a direct identification of these parameters was made to reproduce the results of MD simulations. The results of such identification are reported in Table 2 and will be discussed in section 4. For the moment, it can be noted that the dislocation velocity form adopted in the DD simulations does not account for the non-Schmidt effects existing in BCC metals. These effects are indeed not expected to influence irradiation-hardening processes at elevated temperature [18].

Table 2: List of the velocity coefficients used in the DD simulation for the different slip systems. For viscous coefficient B^s, the first slip system solution was directly fitted on the results of [5], and the same order for the second and third systems [27]. The fourth system solution was the value from [33] when the last system solution was adjusted by try and error tests made with the DD simulations. For friction stress τ_0^s, we used the values found in [18][28] for the first three systems, and set the last two values by try and error tests made with the DD simulations.

$\vec{b}$ Burgers	Planes	B^s (10^{-5} Pa*s)	τ_0^s (MPa)	Reference
½<111>	{110}	8	10	[5] [18][28]
½<111>	{112}	8	10	[18] [27][28]
½<111>	{123}	8	10	[18] [27][28]
<100>	{110}	80	300	[33]
<100>	{100}	9000	300	Fitted

In the following, all computations have been made with a simulation time step equal to 5 10^{-15} s and the imposed strain rate $\dot{\varepsilon}_{xz}$ was set to 10^7 s^{-1}. Given the applied simulation geometry the equilibrium steady-state dislocation velocity is 48 m/s.

3 Results

The simulation results reported in this section illustrate the capacity of the DD simulation model NUMODIS at reproducing the complex dislocation-loop reactions first studied in [5]. For each SIA loop configuration, details on the interaction processes observed and calculation of the passing critical stress (i.e. the applied stress needed for the edge dislocation to move away from the locking configuration made at contact with the SIA loop) are reported.

3.1 S_{+1} configuration

The S_{+1} configuration is a square SIA loop with a burgers vector [100] and sides along the [011] and [$0\bar{1}1$] directions. At the beginning of the calculations, the center of the SIA loop lies in the edge dislocation glide plane (see Table 1).

In Fig. 2 and Fig. 3, three simulation snapshots captured at the same time in the DD and the MD simulations can be compared. We see that the reaction path obtained in the MD simulation is precisely reproduced with the DD simulation.

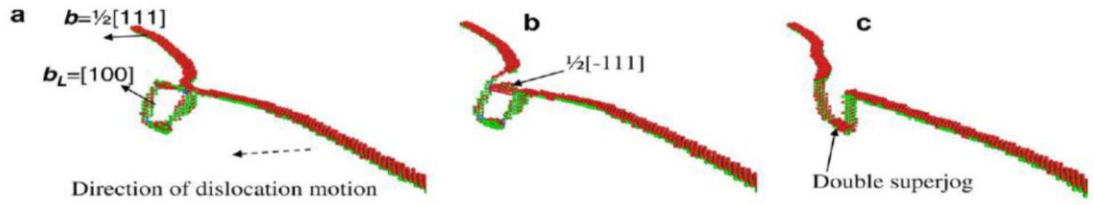


Fig. 2: Snapshot of the S_{+1} reaction path in three stages as depicted with MD simulation. (Reprinted from [5] with permission of Elsevier)

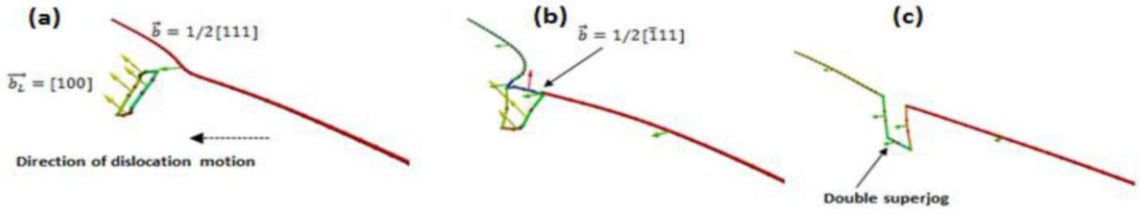


Fig. 3: Snapshot of three different stages of the S_{+1} elementary reaction found with the DD simulation. The time corresponding to image a, b and c is 0.003, 0.004 and 0.04 ns, respectively.

During this reaction, the mobile edge dislocation is first attracted by the S_{+1} loop (see Fig. 2a and Fig. 3a) and hence bows towards the loop. Such elastic interaction justifies the rapid stress decrease observed in the stress-strain curve (see point ① in Fig. 8). This relaxation is a consequence of using constant strain rate condition in the simulations. Then, the S_{+1} SIA loop starts to glide down until its upper side contacts the edge dislocation line (see Fig. 2b and Fig. 3b). The upper side of the loop is then converted into a segment with a Burgers vector ***b***=½ [$\bar{1}$11] by the following favorable reaction:

$$\frac{1}{2}[111] - [100] = \frac{1}{2}[\bar{1}11] \quad (2)$$

This new segment glides down across the loop in a $[\bar{1}0\bar{1}]$ plane and converts the remainder of the SIA loop to ***b***=1/2[111] by the reaction:

$$[100] + \frac{1}{2}[\bar{1}11] = \frac{1}{2}[111] \quad (3)$$

Finally, the SIA loop is completely incorporated on the mobile edge dislocation in the form of a super-jog (see Fig. 2c and Fig. 3c). This jogged dislocation is free to glide under a constant stress level about 30 MPa (see Fig. 8). Such value is very close to the solution found with the DD simulation for a jog-free edge dislocation gliding in a $(1\bar{1}0)$ plane.

3.2 $S_{+0}U$ configuration

The second tested configuration is the $S_{+0}U$. This configuration is made of a square SIA loop with a Burgers vector [100] and sides oriented along the [010] and [001] directions. In our calculation, complied with the conditions studied in [5], the lower side of the loop is initially located in the edge dislocation glide plane (see Tab. 2).

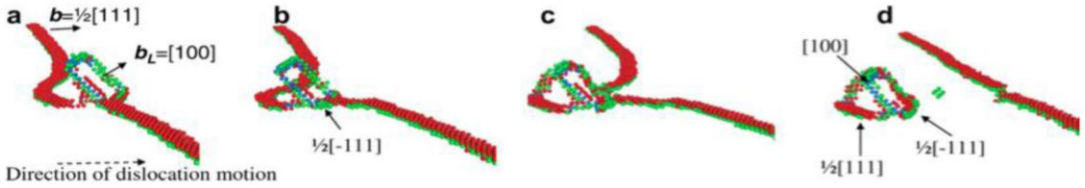


Fig. 4: Snapshot of the $S_{+0}U$ reaction path in four stages as depicted with MD simulation. (Reprinted from [5] with permission of Elsevier)

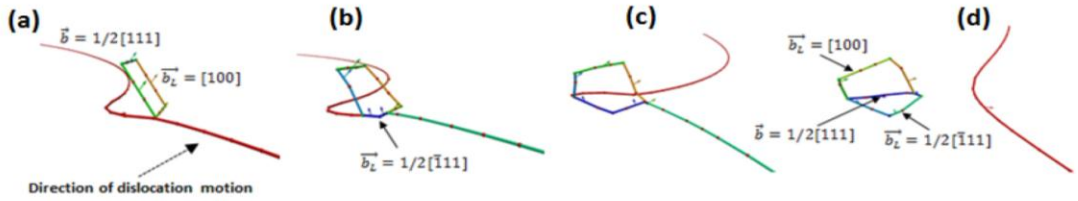


Fig. 5: Snapshot of four different stages of the $S_{+0}U$ elementary reaction found with the DD simulation. The time corresponding to image a, b, c and d is 0.25, 0.297, 0.35 and 0.36 ns, respectively.

From Fig. 5, we see that the $S_{+0}U$ elementary reaction path previously obtained with the MD simulation (see Fig. 4) is well reproduced with the DD simulation model. In both MD and DD calculations, the edge dislocation is first repelled by the SIA loop and bows backwards (see Fig. 4a and Fig. 5a). When the applied stress increases enough, the mobile dislocation line comes in contact with the nearest corner at the bottom side of the SIA loop. Then, the edge dislocation and the SIA loop lines start to react according to equation (2). This reaction converts the whole bottom side and a part of the left side of the loop to a segment with a Burgers vector ***b***=½ $[\bar{1}11]$ (see Fig. 5b and Fig. 5c). As the stress keeps on increasing, the left side of the edge dislocation continues to bow forward and finally breaks away after meeting the opposite SIA loop line section pinned at a loop corner. Eventually, two complex dislocation loops with Burgers vector ***b***=½ $[\bar{1}11]$ and ***b***=½ [111] intersected

at 90° are left behind with the pre-existing common [100] segments in the edge dislocation glide plane. The critical unpinning stress calculated with the DD simulation for this reaction is about 130 MPa and compares well with the MD result (see Fig. 8).

3.3 S_{-0} Configuration

The last tested configuration is S_{-0}. This configuration is a square SIA loop with a Burgers vector [010] and its sides oriented along the [100] and [001] directions (see Fig. 6 and Fig. 7). Like in the S_{+1} configuration, the SIA loop center is initially located in the edge dislocation glide plane (see Table 1).

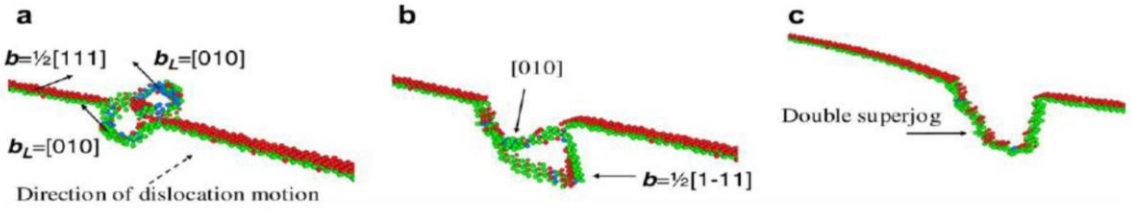


Fig. 6: Snapshot of the S_{-0} reaction path in three stages as depicted with MD simulation. (Reprinted from [5] with permission of Elsevier)

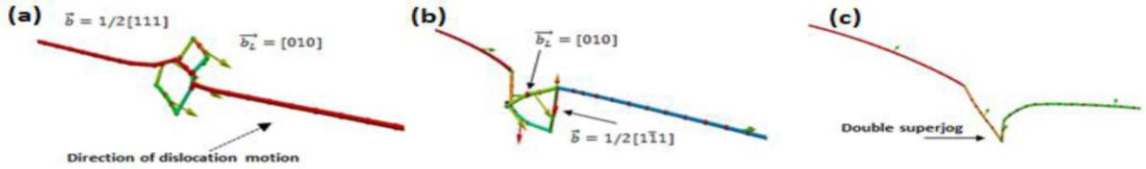


Fig. 7: Snapshot of the S_{-0} reaction path in three stages as reproduced with the DD simulation, the time corresponding to image a, b, and c is 0.14, 0.32 and 0.49 ns, respectively.

Again, the reaction path previously found with MD simulations (see Fig. 6) is successfully reproduced with the DD simulation (see Fig. 7). More precisely, in both cases we see that the edge dislocation line is first repelled by the loop as the two defects are elastically repulsive. When increasing the applied stress, the dislocation moves forward and is suddenly attracted and pushed forward when touching the middle part of the SIA loop (see Fig. 7a). Like in the S_{+1} configuration, this non-contact interaction leads to a decrease of the applied stress on the stress-strain curve as reported in Fig. 8 (see point ②). From this stage (see Fig. 7b), the initial upper part of the loop is progressively converted in segments with Burgers vector $\boldsymbol{b}$=½ $[1\bar{1}1]$ with the help of the reaction:

$$\frac{1}{2}[111] - [010] = \frac{1}{2}[1\bar{1}1] \quad (4)$$

This reaction ends when the remaining [010] segments of the loop glide down to convert the newly formed ½$[1\bar{1}1]$ segments to $\boldsymbol{b}$=½[111] following the reaction:

$$\frac{1}{2}[1\bar{1}1] + [010] = \frac{1}{2}[111] \quad (5)$$

Finally, the transformed SIA loop is completely absorbed on the edge dislocation (see Fig. 7c), and as previously observed in the S_{+1} configuration, a super-jog is formed along the mobile edge dislocation. At the end of the reaction the edge dislocation is relatively free to glide with, one side of the super-jog gliding in a $(\bar{3}12)$ plane and the other side in a $(11\bar{2})$ plane. In agreement with MD simulations, the S_{-0} configuration requires the highest unpinning stress, being about 152 MPa.

3.4 SIA loops pinning strength

It is worth to note that the three above discussed configurations (S_{+1}, $S_{+0}U$ and S_{-0}) were investigated with the identical set of DD simulation parameters. Hence, the demonstration has been made that the NUMODIS simulation model can capture many details of the edge dislocation-SIA loop reactions previously observed by Terentyev *et al.* [5]. Now, the Stress-Strain curves computed with both simulation methods and for the three different configurations are compared in Fig. 8. Analysis of the atomistic (MD) and elastic (DD) simulation results shows that the latter curves are systematically smoother than the MD simulation counterparts. This effect is not surprising and comes from both the atomic vibration due to finite temperature in MD simulations and the lower number of degrees of freedom used in DD simulation to integrate dynamics. More important, the pinning strength hierarchy found for the three-tested configurations is independent of the simulation method. Thus, the DD tool captures not only the details of the interaction mechanisms but also reproduces the resulting strengthening. Nevertheless, small differences exist between the results of the simulations. Whatever the tested configuration, the Stress-Strain curves obtained with DD simulations always exhibit a larger strain at the end of the reaction. Such feature can very likely be explained with dislocation line tension differences in both types of simulations. Indeed, in DD simulations the passing dislocation curvature at the critical configuration is larger. This suggests that the dislocation line tension computed in DD simulation based on isotropic elasticity formula underestimates the one in the atomistic calculations. Nevertheless, as reported in table 3, the pinning strength values calculated for all SIA loops configurations with the different simulations are always very close to the MD result. In average, the difference between the two simulation methods is about 18%.

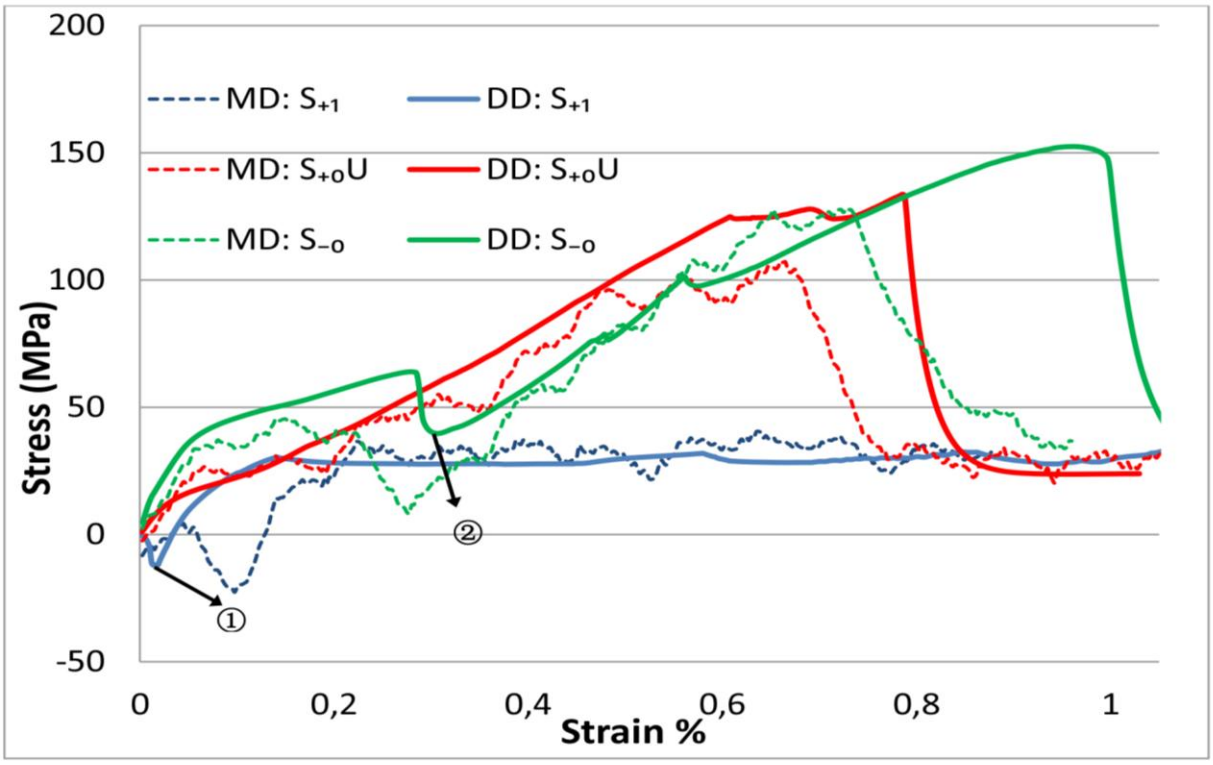


Fig. 8: Comparison of the Stress-Strain calculated for the SIA loop configurations S_{+1}, $S_{+0}U$ and S_{-0}. Dotted lines are the results of MD simulations [5] and continuous lines the results of DD simulations.

Table 3.Critical stress to unpin an isolate edge dislocation in slip system ½<111>{110} from 3 different SIA loop configurations. Comparison is made between the results of MD simulations [5] and DD simulations.

Type	MD(MPa)	DD(MPa)	Difference
S_{+1}	35	30	14%
$S_{+0}U$	110	130	18%
S_{-0}	128	152	19%

4 Remarks and observations

The definition of the dislocation mobility in each slip systems is an essential input of the DD simulations. Unfortunately, the velocity laws and the corresponding law parameters required in the present study can hardly be identified from existing experimental or theoretical works. During the preparatory work of this study, it was found that the results of our DD simulations were very sensitive to the amplitudes of the velocity considered for the slip system <100>{001}. Indeed, the different solutions we tested for this slip system could cause very different reactions for the $S_{+0}U$ and

the S_{-0} loop configurations. Hence, a special attention has to be paid to the identification of the mobility law for the slip system <100>{001}.

It is commonly admitted that the dislocation mobility in all slip systems except <100>{001} is relatively high in α-iron at high temperature [24][26][27][28][29][30]. Therefore, the dislocation velocity in all the slip systems was calculated using Eq. 1, varying a damping coefficients B in the range 2.5 and 40 x 10^{-5} Pa*s. Then, having in mind that the ½<111>{110} slip system exhibits the highest dislocation mobility, the corresponding B^s coefficient was adjusted to reproduce the MD measured critical shear stress (being about 30MPa) in the S_{+1} configuration, by choosing the friction stress τ_0 to be a constant value for BCC crystal (see Fig. 8). This fitting process allowed fixing a reference value of B=8 x 10^{-5} Pa*s which is very similar to the value obtained in [26]. Subsequently, the dislocation mobility and the friction stress in the ½<111>{112} and ½<111>{123} slip systems were chosen to be the same, as reported in Table 2. In the case of the ½<111>{112}, MD simulations have recently shown that the friction stress for the edge dislocation is negligibly small at 250K and above [27], just as in the well-studied ½<111>{110} slip system. Mobility and activation of the edge dislocation in the ½<111>{123} system was also studied in [31] applying the same methodology as in [27]. It is also found that the friction stress for the edge dislocation reduces to several MPa as the ambient temperature reaches 200K. Hence, the usage of similar B for the edge dislocation in the ½<111>{110}, ½<111>{112}, ½<111>{123} slip systems at room temperature is believed to be a justified approximation.

For the <100>{110} slip system, we used the value obtained directly by MD simulations [32][33] about 8 10^{-4} Pa*s. Finally, for the <100>{001} slip system, atomistic simulations have not shown any direct evidence of dislocation glide [34]. Nevertheless, some dislocation reactions observed in the MD simulations suppose line displacement in the <100>{001} slip system [5][32]. To reproduce this observation, the dislocation mobility in <100>{001} slip system must be thermally activated and associated with a rather high activation energy. The modeling of thermally activated dislocation mobility in DD simulations is problematic when calculations involve co-existence of dislocations with significantly different mobility [35][36][37], a mobility law governed by Eq. 1 was therefore considered for the <100>{001} slip system by assigning a very high drag coefficient. Trial and error simulations were finally made to identify the <100>{001} B^s value, which allows one reproducing the MD result. Considering all the aspects above, B^s = 9 10^{-2} Pa*s was finally taken to complete the parameterization of dislocation mobility. For both <100>{001} and <100>{011} slip systems, our simulations are not sensitive to the friction stress τ_0. We set it to be about 300 MPa following the best agreement with MD results for the simulation involving the interaction of the ½<111>{110} edge dislocation with a ½<111> hexagonal loop inclined to the dislocation slip plane. The details of this study will be discussed in an upcoming publication.

It must be noticed that once the parameters of the slip system velocity laws are set (see Table 2), the DD simulation results are essentially insensitive to the time step used to integrate dislocation dynamics. Therefore, timeframe and crystal dimensions thousand times bigger than in the MD simulations can be easily explored in the DD simulations without affecting the accuracy of the simulation results.

Finally, we simulated the S_{00} configuration also investigated in [5]. The DD simulation parameters were identical to those used to simulate S_{+1}, $S_{+0}U$ and S_{-0} configurations. Unfortunately, the reaction

path predicted by the MD could not be reproduced. Detailed analysis of the reaction pathway in the MD and DD simulations has shown that the reproduction of the reaction by the NUMODIS tool requires implementation of new types of dislocations reactions. Work is in progress to develop and implement this feature in the NUMODIS code.

5 Conclusions and perspectives

The present DD study was focused on the elementary reactions and strengthening mechanisms involving an edge dislocation interacting with the <100> dislocation loops in irradiated α-Fe, most commonly observed upon neutron irradiation at PWR temperature and above. Comparison with the results of MD simulations published in [5] proved the capability of the present DD simulation model to quantitatively reproduce all the important elementary features observed in more fundamental simulations at the atomic scale. Currently, we can draw the following conclusions and perspectives:

1. Quantitative difference for the unpinning stress measured by the MD and DD simulations amounts to 18% in average. Considering the computation accuracy and the physical approximations behind both simulation methods, this gap is believed to be satisfactory and no further investigation was made to improve the DD simulation models.
2. The present DD simulation results show the solid reliability of the elastic theory to reproduce dislocation properties. Hence, simulations that may be too difficult to realize at the atomic scale, for example to explore much lower deformation rates comparable to experimental conditions, could be considered using the defined here DD tool and its parameterization.
3. In a multi-scales modeling approach, the main benefit of the DD simulations is of course their capacity to investigate the collective response by considering the interaction of a dislocation array with a realistic loop microstructure (in terms of density, size and spatial distribution), which corresponds to specific irradiation conditions. Such type of simulations have already been published, but with DD simulation codes using constitutive rules simplifying a lot the elementary mechanisms tested in the present study [38][39][40] with the notable exception of [41]. Work is in progress to explore if this model can extend or modify the already established DD predictions.

Acknowledgements

This work was mainly performed in the framework of the *PERFORM60* project. The authors acknowledge the support of the French Agence Nationale de la Recherche (ANR) under reference ANR-10-COSI- 0011 (OPTIDIS) for the numerical development of code NUMODIS. We are also grateful to the other developers of NUMODIS, M. Blétry, M. Fivel, E. Ferrié, A. Etcheverry and O. Coulaud, and also acknowledge E. Clouet for fruitful discussions.

Reference

[1] D.J. Bacon, F. Gao and Y.N. Osetsky, Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B **153** (1999) 87.
[2] Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, A. Serra, B.N. Singh, S.I. Golubov, Phil. Mag. **83** (2003) 61.
[3] Y.N. Osetsky, M. Victoria, A. Serra, S.I. Golubov and V. Priego, J. Nucl. Mater.**251** (1997) 34.
[4] Y.N. Osetsky, A. Serra and V. Priego, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **25** (1998) 59.
[5] D. Terentyev, P. Grammatikopoulos, D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, Acta Materialia, **56** (2008) 5034-5046.
[6] Z. Rong, Y. N. Osetsky & D. J. Bacon, Philos. Mag, **85** (2005) 1473-1493.
[7] D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, Z. Rong, Philos. Mag. **86** (2006) 392.
[8] D. Terentyev, Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, Scripta Mat. **62** (2010) 697.
[9] J. Marian, B.D. Wirth, R. Schäublin, G.R. Odette, J. Manuel Perlado, J. Nucl. Mater.**323** (2003)181-191.
[10] D. Terentyev, G. Monnet, P. Grigorev, Scripta Materialia **69** (2013) 578–581.
[11] G. Monnet, L. Vincent, B. Devincre, Acta Materialia **61** (2013) 6178-6190.
[12] CS. Shin, MC. Fivel, D. Rodney, R. Phillips, VB. Shenoy, L. Dupuy, Le Journal de Physique IV, **11** (2001)
[13] E. Martinez, J. Marian, A. Arsenlis, M. Victoria, JM. Perlado, Phil. Mag. **88** (2008), 809-840
[14] B. Devincre, L.P. Kubin, Mater. Sci. Eng. A **8** (1997) 234-236.
[15] B. Devincre, L.P. Kubin, C. Lemarchand, R. Madec, Mater. Sci. Eng. A **309-310** (2001) 211-219.
[16] V.V. Bulatov, L.L. Hsiung, M. Tang, A. Arsenlis, M.C. Bartelt, V. Cai, J.N. Florando, M. Hiratani, M. Rhee, G. Hommes, T.G. Pierce and T. Diaz de la Rubia, Nature **440** (2006) 1174-1178.
[17] A.Nomoto, N. Soneda, A. Takahashi, S. Ishino, Mater. Trans. **46** (2005) 463.
[18] D. Terentyev, L. Malerba, D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, J Phys: Condens. Matter **19** (2007) 456211.
[19] M.L. Jenkins, Z. Yao, M. Hernandez-Mayoral, M.A. Kirk, J. Nucl. Mater. **389** (2009) 197.
[20] J. Drouet, L. Dupuy, F. Onimus, F. Mompiou, S. Perusin, A. Ambard, J. Nucl. Mater. **449** (2014)252-262.
[21] V.V. Bulatov, W. Cai, Computer Simulations of Dislocations, Oxford University Press, Oxford, 2006.
[22] A. Arsenlis, W. Cai, M. Tang, M. Rhee, T. Oppelstrup, G. Hommes, T.G. Pierce and V.V.Bulatov, Model. Sim. Mat. Sci. Eng. 15 (2007) 553-595.
[23] W. Cai, C. Weinberger, V.J. Bulatov, Mech. Phys. Solids 54 (2006) 561–587.
[24] Y.N. Osetsky and D.J. Bacon, Model. Sim. Mater. Sci. Eng **11** (2003) 427.
[25] L. Kubin, Dislocations, mesoscale simulations and plastic flow. Vol. 5. Oxford University Press, 2013.
[26] D. Terentyev, D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, J. Phys.: Condens. Matter **20** (2008) 445007
[27] G. Monnet, D. Terentyev, Acta Materialia, **57**(5), (2009) 1416-1426.
[28] S. Queyreau, J. Marian, M.R. Gilbert, B.D. Wirth, Physical Review B, **84**(6), (2011) 064106.
[29] A.Y. Kuksin, A.V. Yanilkin, Physics of the solid state, **55**(5), (2013) 1010-1019.
[30] N. Urabe, J. Weertman, Materials Science and Engineering, **18** (1975) 41-49.
[31] D. Terentyev, A. Bakaev, X.J. Shi and D. van Neck, submitted to Model. Sim. Mat. Sci. Eng.
[32] D.A. Terentyev, Y.N. Osetsky, D.J. Bacon Acta Materialia, **58** (2010) 2477.
[33] D. Terentyev, N. Anento, A. Serra, J. Nucl. Mater. **420** (2012) 9–15.
[34] N. Kumar, R. Tewari, P.V. Durgaprasad, B.K. Dutta, G.K. Dey, Computer Mater. Sci. **77** (2013) 260–263.
[35] G. Monnet, B. Devincre, and L. Kubin, Acta materialia **52** (2004) 4317–4328.
[36] J. Chaussidon, F. Marc, R. David, Acta materialia **54** (2006) 3407-3416.
[37] S. Naamane, G. Monnet, and B. Devincre, International Journal of Plasticity, **26**(1) (2010) 84–92.
[38] T. Nogaret, C. Robertson, and D. Rodney, Philos. Mag, **87** (2007) 945–66.
[39] N. M. Ghoniem, S.H. Tong, J. Huang, B.N Singh, M Wen, J. Nucl. Mater. **307** (2002) 843-851.
[40] B.N. Singh, N.M. Ghoniem, H Trinkaus, J. Nucl. Mater. **307** (2002) 159-170.
[41] A. Arsenlis, M. Rhee, G. Hommes, R. Cook, J. Marian, Acta Materialia **60** (2012) 3748–3757.

En guise de conclusion sur cette partie traitant des simulations élémentaires d'interactions entre une dislocation coin et des boucles d'irradiation de type <100>, on peut considérer qu'une bonne cohérence à la fois qualitative et quantitative est obtenue entre les résultats obtenus avec le code de DD NUMODIS et ceux issus de la littérature en DM. Ces résultats encourageants nous permettent d'accroitre notre confiance dans la modélisation de ces mécanismes au sein du code de DD.

3.3 Interactions de contact avec des boucles de vecteur de burgers $\frac{1}{2}[1\bar{1}1]$

3.3.1 Hypothèses de calcul

Dans cette partie, nous allons présenter les résultats de simulations obtenus pour l'interaction d'une dislocation coin avec des boucles de vecteur de burgers $\frac{1}{2}[1\bar{1}1]$ en utilisant tous les paramètres que nous venons d'identifier dans la partie précédente et rappelés ci-dessous :

Tableau 3.5 : Jeu de valeurs de mobilité et de friction de réseau identifié sur des résultats de simulation en DM entre une dislocation coin et des boucles de vecteur de Burgers <100>

Burgers	Plans	B (10^{-5} Pa*s)	τ_0 (MPa)
½ <111>	{110}	8	10
½ <111>	{112}	8	10
½ <111>	{123}	8	10
<100>	{110}	80	300
<100>	{100}	9000	300

D'après l'analyse des simulations de DM réalisées pour ce nouveau type d'interaction [Bacon *et al.* 2006, Terentyev *et al.* 2007, Terentyev *et al.* 2010b], nous savons que la dislocation entre en contact direct avec la boucle d'irradiation et que des jonctions se développent. Plusieurs facteurs peuvent influencer de manière significative les résultats de ces simulations.

Tout d'abord, Bacon *et al.* [2006] ont montré que les boucles de petite taille (37SIAs) ne modifiaient que très faiblement le comportement de la dislocation incidente, contrairement à des boucles de plus grande taille (331SIAs). Faute de temps, nous ne réaliserons des simulations de DD qu'avec une seule taille de boucle jugée suffisamment importante pour influencer le comportement de la dislocation incidente mais il convient de garder à l'esprit cette dépendance à la taille des boucles avant de généraliser nos résultats.

Ensuite, Terentyev *et al.* [2007] ont observé (Figure 3.3) lors de simulations avec des boucles contenant 169SIAs que la sensibilité des résultats de DM à la température était plus importante que la sensibilité à la vitesse de déformation.

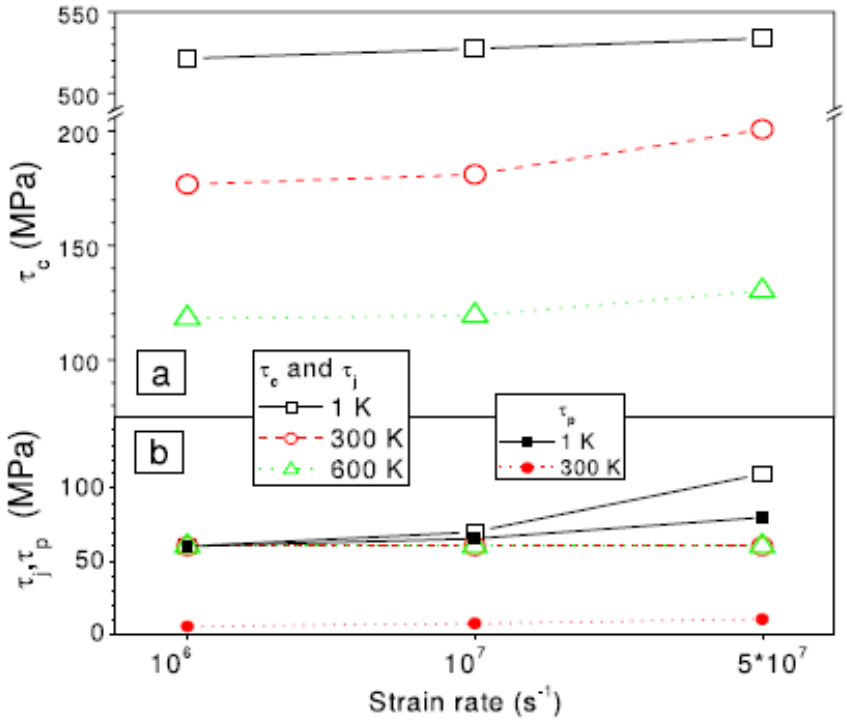


Figure 3.3 Valeurs des contraintes mesurées en DM lors de l'interaction entre une dislocation coin et des boucles de type ½[1$\bar{1}$1], en fonction de la température et de la vitesse de déformation appliquée [Terentyev *et al.* 2007]: (a) Valeurs de la contrainte critique τ_c (b) Valeurs de la contrainte de Peierls τ_p (c) Valeurs de la contrainte continue τ_j après la jonction

Nos simulations de DD sont effectuées avec une loi de mobilité choisie pour décrire le comportement à haute température et nous ne pourrons donc pas reproduire ce type de résultats dans l'immédiat.

Les paramètres (Tableau 3.5) de la loi de mobilité utilisée dans nos simulations de DD ont été identifiés par comparaison avec des simulations de DM qui utilisaient le potentiel interatomique P04 [Ackland *et al.* 2004]. Pour être cohérent dans notre démarche d'évaluation des capacités du code de DD à retranscrire les mécanismes physiques d'interaction entre dislocations et boucles d'irradiation, les nouvelles simulations de DM auxquelles nous allons nous comparer pour le cas d'interactions avec des boucles de type ½[1$\bar{1}$1] utilisent le même potentiel. Il s'agit des simulations effectuées pour T>300K [Terentyev *et al.* 2007]. La Figure 3.4 ci-dessous illustre la configuration des simulations réalisées en DM et en DD.

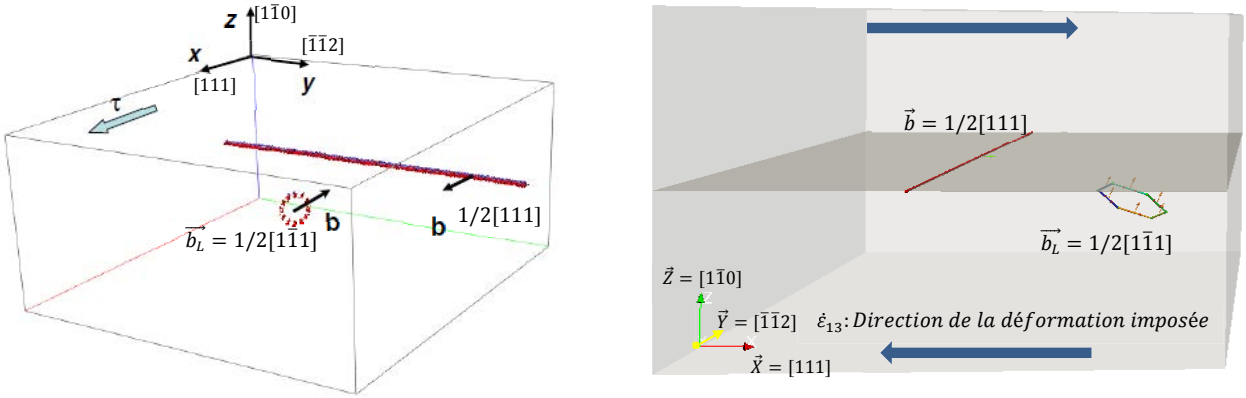


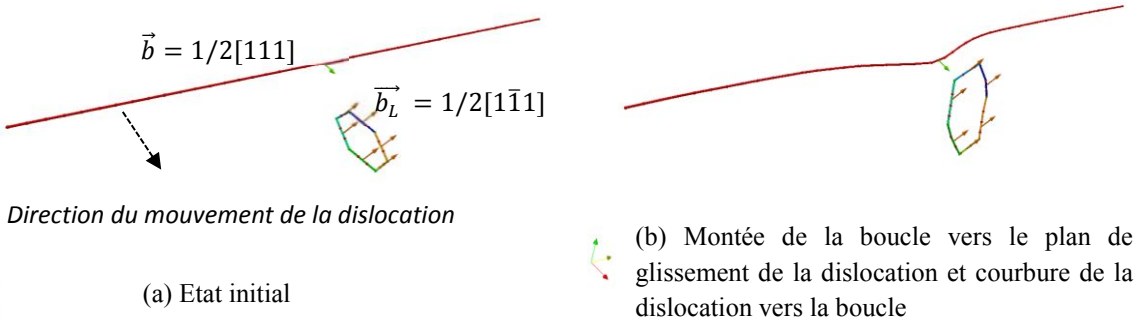
Figure 3.4 Les modèles utilisés en DM (gauche) et en DD (droite)

Toutes les caractéristiques principales des simulations de DM sont reprises dans les simulations de DD :

- Les dimensions de la boite de simulation i.e. L_X=45nm, L_Y=41nm and L_Z=20nm.
- Les conditions aux limites périodiques dans les directions *x [111]* et *y [-1-12]*. La validation de la bonne implantation de ce type de conditions aux limites périodiques dans le code de calcul NUMODIS sera proposée un peu plus loin dans ce chapitre, à la partie 3.4.
- La taille des segments de la boucle : 2nm.
- La vitesse de déformation, $\dot{\varepsilon}_{xz} = 10^7 s^{-1}$. Dans l'article [Terentyev *et al.* 2007], deux autres vitesses de déformation ont aussi été utilisées, $10^6 s^{-1}$ et $5.10^7 s^{-1}$, mais nous avons choisi la vitesse de déformation intermédiaire qui se trouve être également celle utilisée pour l'étude précédente des boucles <100>.

3.3.2 Résultats de simulation

Au cours de la phase préliminaire de déplacement de la dislocation, nous observons sur la Figure 3.5 que la boucle se rapproche du plan de glissement de la dislocation et que son segment supérieur attire la dislocation dans son voisinage immédiat, ce qui se caractérise par une courbure vers l'avant de la dislocation et par une baisse de la contrainte appliquée pour garantir une vitesse de déformation constante (voir plus loin le début de la courbe contrainte-déformation sur la Figure 3.14).



(a) Etat initial

(b) Montée de la boucle vers le plan de glissement de la dislocation et courbure de la dislocation vers la boucle

Figure 3.5 Attraction mutuelle de la boucle de vecteur de Burgers ½$[1\bar{1}1]$ et de la dislocation coin en début de simulation

Dès que le segment supérieur de la boucle entre en contact avec la dislocation, une réaction spontanée se passe d'après la règle de Frank (voir l'équation ci-dessous) en formant un segment de vecteur de Burgers $[010]$.

$$\frac{1}{2}[111] - \frac{1}{2}[1\bar{1}1] = [010] \tag{30}$$

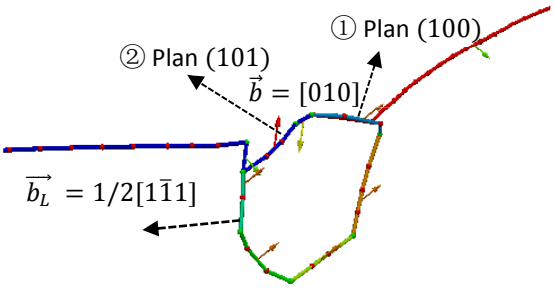


Figure 3.6 Formation d'un segment avec un nouveau vecteur de Burgers lors de l'interaction dislocation coin / boucle de vecteur de Burgers ½$[1\bar{1}1]$.

La Figure 3.6 nous montre que la même réaction se passe entre la dislocation et le segment de la boucle situé juste à côté du segment supérieur de celle-ci qui avait réagi en premier avec la dislocation. Un nouveau segment avec le même vecteur de Burgers $[010]$ est donc créé sauf que cette fois-ci, ce segment ① se situe dans un plan (100) qui est beaucoup moins mobile que le segment ② situé dans le plan (101) (le premier segment à avoir été formé au cours de cette réaction). Au cours de cette première phase d'interaction entre la dislocation et la boucle, le reste de la boucle garde son vecteur de Burgers initial $\frac{1}{2}[1\bar{1}1]$.

Les deux segments nouvellement formés (① et ② sur la Figure 3.6) ont le même vecteur de Burgers $[010]$ et sont donc sessiles dans le plan de glissement de la dislocation $(1\bar{1}0)$. Ils restent alors bloqués dans la configuration de la Figure 3.6 tant que la contrainte appliquée reste faible.

En augmentant la contrainte, les deux extrémités de la dislocation se courbent jusqu'à prendre un caractère vis, ce qui permet d'activer un glissement dans les plans $\{10\bar{1}\}$, autorisant ainsi la descente du segment ② avec le vecteur de Burgers $[010]$ dans le plan (101) (voir la Figure 3.7).

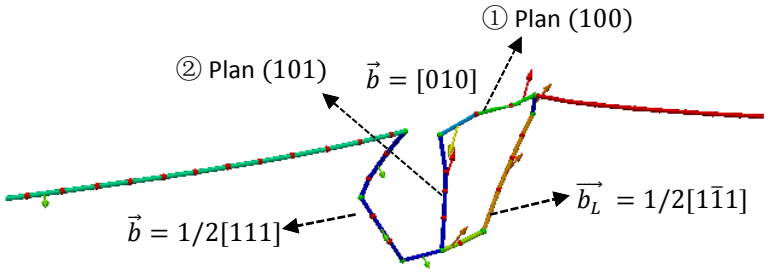


Figure 3.7 Descente du segment ② par cross-slip dans le plan (101).

Le vecteur de Burgers initial $½[1\bar{1}1]$ des deux segments de gauche de la boucle (Figure 3.7) devient alors le même que celui de la dislocation initiale en suivant la relation suivante:

$$[010] + \frac{1}{2}[1\bar{1}1] = \frac{1}{2}[111] \tag{31}$$

Dans la Figure 3.7, on peut voir que le segment ① ne bouge pas pendant cette période et qu'il reste toujours dans son plan initial (100). En augmentant la contrainte appliquée, la dislocation continue de se courber et l'extrémité gauche du segment ① descend alors dans le plan (100) jusqu'à ce que les segments ① et ② ne soient remplacés par un nouveau segment ③ glissant dans le plan (100) avec toujours le même vecteur de Burgers [010], comme nous le montre la Figure 3.8 :

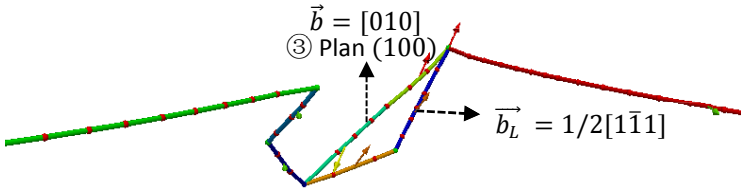


Figure 3.8 Disparition des deux segments ① et ② et formation du nouveau segment ③ dans le plan (100).

Avec l'augmentation de la contrainte appliquée et de la courbure de la dislocation, les deux extrémités du segment ③ bougent dans les directions communes entre le segment ③ et les segments restant de la boucle de vecteur de Burgers $½[1\bar{1}1]$ en formant de nouveaux segments de vecteur de Burgers $½[1\bar{1}1]$ comme la réaction (3) décrite précédemment (Figure 3.9).

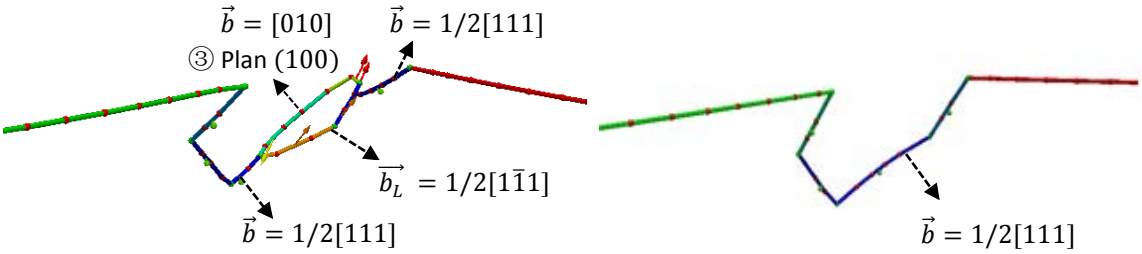


Figure 3.9 Réaction finale entre le segment ③ et le reste de la boucle

Finalement, la boucle est complètement absorbée par la dislocation en formant un double-écran (Figure 3.9 et Figure 3.10).

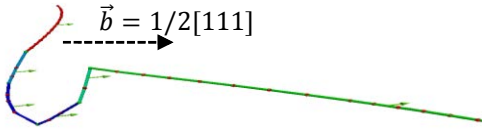


Figure 3.10 Vue arrière de la dislocation finale avec son double-écran après absorption de la boucle d'irradiation.

La Figure 3.11 ci-dessous nous montre des images de comparaison entre les résultats de simulation en DD et en DM. Les niveaux de contrainte appliquée obtenus avec les deux codes sont également indiqués.

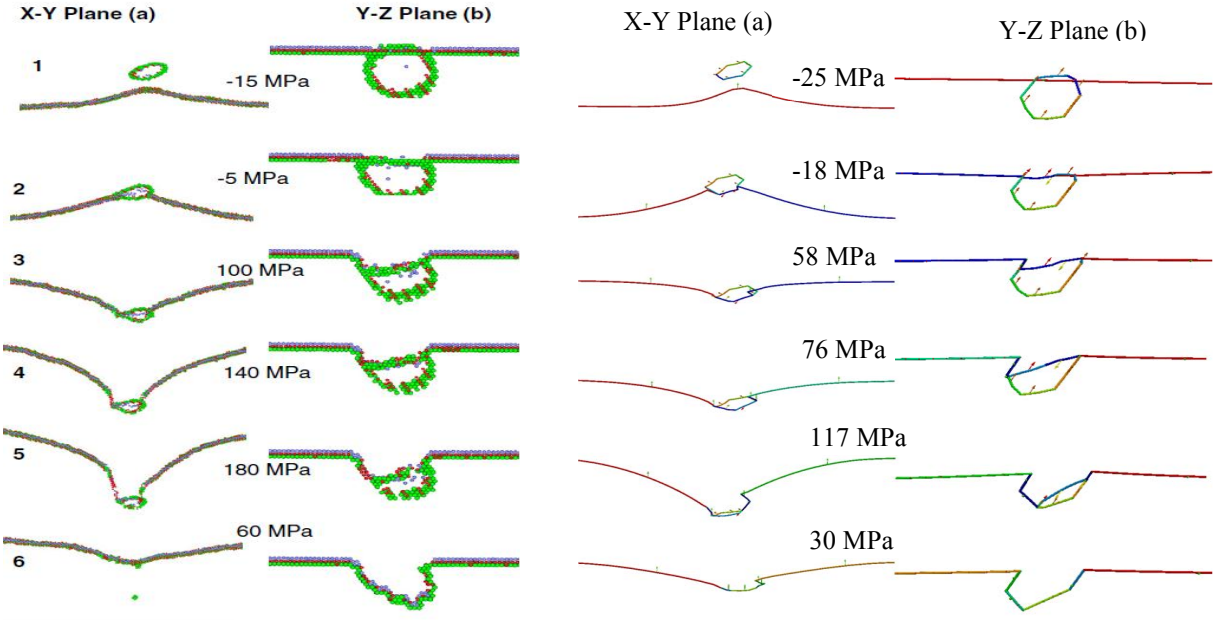


Figure 3.11 Comparaison des séquences d'interaction entre une dislocation coin et une boucle <1-11> obtenues par simulation en DM [Terentyev *et al.* 2007] (à gauche) et en DD (à droite).

Les réactions de référence (R_{ref}) en DD et en DM sont assez cohérentes excepté pour l'étape 5 dans la Figure 3.11 ci-dessus. Dans les simulations de DD, un des deux segments [010] est descendu avant l'autre

parce qu'ils se situaient dans les plans ayant des mobilités très différentes (Tableau 3.5). Rappelons que cette différence importante de mobilité imposée entre les systèmes <100>{011} et <100>{010} est le résultat d'une analyse bibliographique et d'une identification quantitative sur les interactions entre une dislocation coin et des boucles de vecteur de Burgers <100>.

En DM, même si cela n'apparaît pas très clairement sur la Figure 3.11, il n'est pas fait mention de cette différence de comportement entre les deux segments de la boucle qui se sont transformés lors du premier contact avec la dislocation.

Etant donné que les valeurs des coefficients de viscosité sont imposées par l'étude précédente sur les boucles <100>, le seul paramètre sur lequel des modifications peuvent encore être apportées est la friction de réseau de ces deux systèmes, laquelle est très mal connue.

Dans l'article [Terentyev *et al.* 2012], la contrainte de friction pour le système <100>{110} a été estimée à environ 10MPa. La Figure 3.12 ci-dessous nous montre alors les réactions obtenues dans NUMODIS en mettant $\tau_0 = 10\text{MPa}$ pour les deux systèmes de glissement :

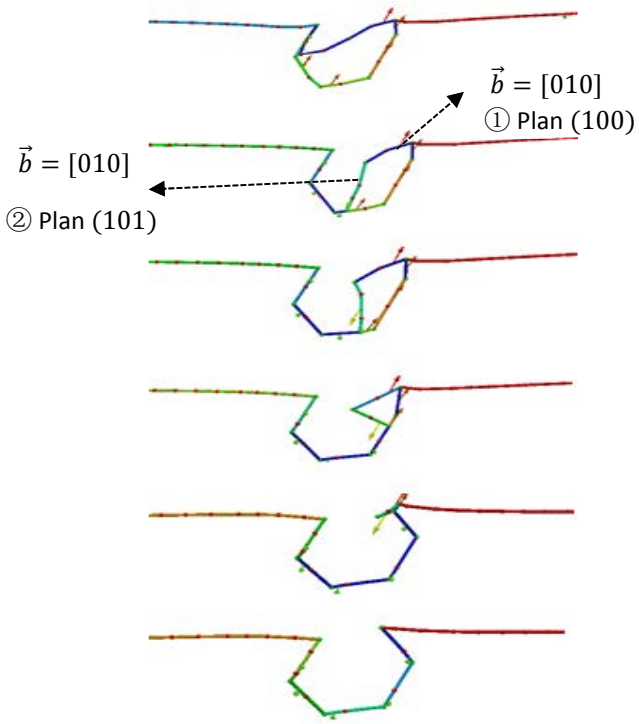


Figure 3.12 Réactions R_s obtenues dans NUMODIS en mettant $\tau_0 = 10MPa$ pour les systèmes de glissement <100>{110} et <100>{100}

On observe sur la Figure 3.12 que le segment [010] dans le plan (101) est plus mobile que dans le cas de la simulation précédente (Figure 3.11). Ce segment absorbe la boucle de gauche à droite tandis que l'autre segment ayant le même vecteur de Burgers [010] mais un plan d'habitat (100) reste immobile. Cette réaction (appelée R_s pour la distinguer de la réaction de référence obtenue précédemment) s'éloigne de celle obtenue en DM. De plus, la contrainte critique nécessaire pour absorber la boucle devient très faible par rapport à la valeur estimée par DM.

Afin d'augmenter la contrainte critique d'une part et de réduire l'écart important de mobilité observé entre les deux segments d'autre part, nous avons donc essayé d'augmenter la valeur de τ_0 dans nos simulations de DD. Les réactions d'une autre simulation (appelée R_b) obtenue en choisissant $\tau_0 = 700MPa$ sont représentées dans la Figure 3.13 ci-dessous :

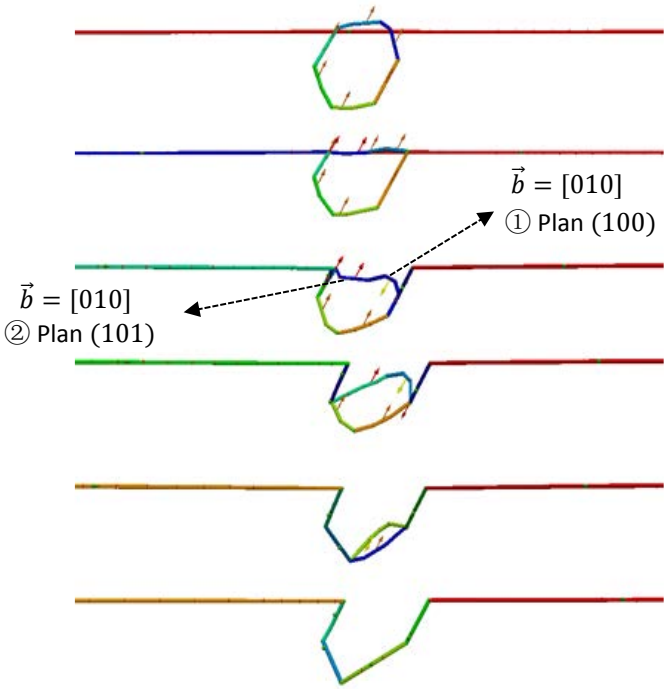


Figure 3.13 Réactions R_b obtenues avec NUMODIS en mettant $\tau_0 = 700MPa$ pour les systèmes de glissement <100>{110} et <100>{100}

Dans cette réaction R_b, on observe que le segment [010] défini dans le plan (100) descend lentement mais cette fois-ci plus tôt que l'autre segment défini dans le plan (101). Quand la contrainte effective sur le segment dans le plan (101) devient supérieure à 700MPa, celui-ci commence à descendre et rattrape le premier segment (descente plus rapide). Au final, on voit qu'il y a moins d'écart de comportement entre ces deux segments et que les réactions R_b sont plus proches de celles observées en DM.

Nous n'avons pas trouvé assez d'information sur la friction de réseau du système <100>{100} hormis le fait que cette valeur doit a priori être grande. Nous avons effectué des simulations en mettant la même valeur de τ_0 pour les deux systèmes <100>{011} et <100>{010}, et nous avons trouvé que les réactions évoluaient du type R_s vers le type R_b en passant par la réaction R_{ref} en augmentant la valeur de τ_0. La Figure 3.14 ci-dessous nous donne les courbes de contrainte-déformation avec les différentes valeurs de τ_0 utilisées dans nos simulations.

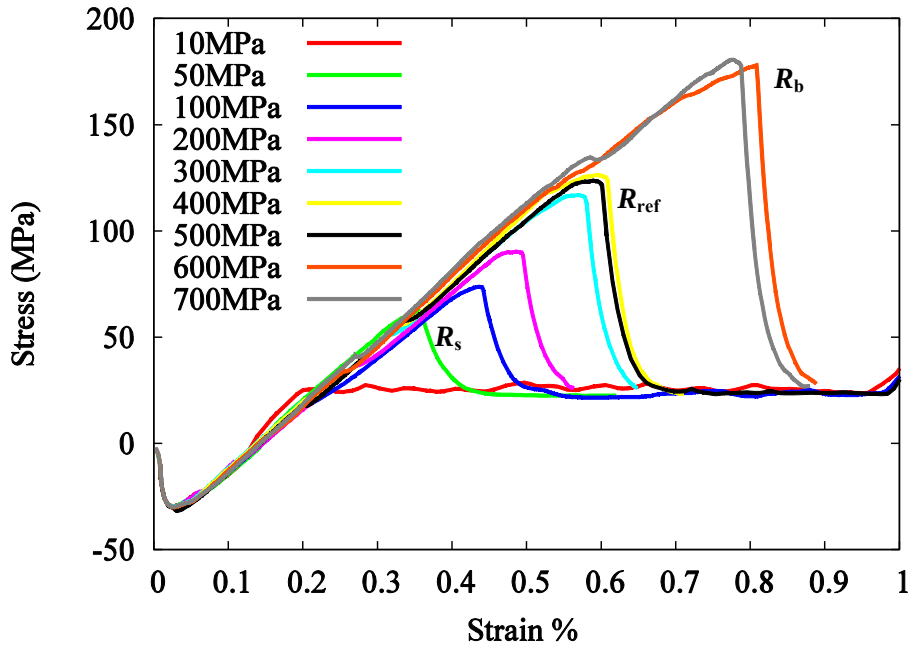


Figure 3.14 Les courbes contrainte-déformation avec les différentes valeurs de τ_0 utilisées pour les deux systèmes <100>{110} et <100>{100}.

En DM, la contrainte critique obtenue est égale à environs 180MPa et la contrainte continue qui subsiste après l'absorption de la boucle est égale à environ 60MPa, soit deux fois plus que la valeur mesurée dans les simulations de la partie précédente sur les boucles de type <100>.

Nous pouvons conclure que la contrainte critique obtenue et les réactions reproduites avec NUMODIS s'approchent des résultats de DM quand la contrainte de friction τ_0 est la plus élevée des valeurs utilisées dans la Figure 3.14, c'est-à-dire à partir de 600MPa. Lorsque la contrainte τ_0 est moindre mais néanmoins supérieure à 300MPa, un deuxième type de réaction est obtenu et qui reste assez proche des résultats de DM. Par ailleurs, il est important de noter que nous n'avons trouvé aucune influence de la valeur de la contrainte de friction de ces systèmes sur les interactions avec les boucles de type <100>.

Finalement nous avons retenu une valeur moyenne de τ_0=300MPa pour les deux systèmes <100>{011} et <100>{010} dans toutes nos simulations pour les raisons suivantes :

1. Une valeur de τ_0=600MPa apparait un peu excessive d'après [Terentyev *et al.* 2012].
2. La contrainte critique obtenue en DM passe de 180MPa pour T=300K à 120MPa pour T=600K. Pour le moment, les simulations réalisées en DD sont concentrées uniquement sur le régime athermique (entre 300K et 600K), et par conséquent, une contrainte critique moyenne de 150MPa nous semble être une référence raisonnable pour ce régime.
3. Une différence de 30MPa sur la contrainte critique (soit 20%) entre DD et DM est acceptable vu qu'il existe déjà une différence de 30MPa (dans le même sens) sur la contrainte d'écoulement qui subsiste après la formation du double-cran.

3.4 Interaction à longue distance avec des boucles de vecteur de burgers ½[111]

Après avoir identifié les paramètres de la loi de mobilité utilisée dans nos simulations de DD sur les cas d'interaction à courte distance entrainant un contact direct entre dislocation coin et boucle d'irradiation, nous cherchons dans cette partie à évaluer les capacités de notre modèle à reproduire les interactions à longue distance et sans contact observées en DM entre une dislocation coin et des boucles de même vecteur de Burgers pouvant glisser selon un axe parallèle au plan de la dislocation.

Du fait du manque d'information détaillée pour ce type de simulations réalisées avec le potentiel P04, nous avons préféré utiliser comme source de comparaison les résultats plus nombreux publiés dans [Rong *et al.* 2005] et qui utilisaient le potentiel P97. Etant donné que les différences principales qui existent entre ces deux potentiels concernent essentiellement les caractères du cœur de la dislocation vis, nous pensons que l'effet du potentiel utilisé en MD sur le résultat des simulations d'interaction à longue distance n'impliquant pas de contact direct entre dislocation et boucle sera minime. Toutefois, il convient de noter qu'il existe une différence d'un facteur deux ou trois sur la valeur de mobilité entre ces deux potentiels [D. Terentyev *et al.* 2008a]. Par soucis de simplification lors de la phase de comparaison entre nos résultats de DD et ceux de DM, nous avons donc choisi de changer les valeurs de viscosités identifiées précédemment et de les remplacer par celles obtenues en DM par Rong *et al.* [Rong *et al.* 2005]. Si le modèle est validé dans cette phase de comparaison, alors nous pourrons raisonnablement prédire dans un second temps quel seraient les résultats que l'on peut attendre de simulations de DM utilisant le potentiel P04.

Dans les simulations faites en DM par Rong [Rong *et al.* 2005], les auteurs ont observé que les boucles d'irradiation ont une influence sur la mobilité de la dislocation. Des conditions aux limites périodiques selon les directions x [111] et y [11$\bar{2}$] (Figure 3.15) ont été utilisées en DM.

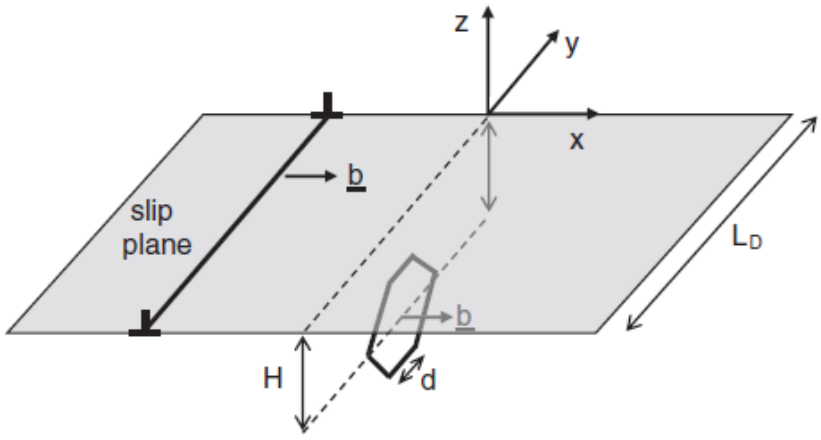


Figure 3.15 Modélisation de l'interaction d'une dislocation coin et d'une boucle [111] en DM, d'après [Rong *et al.* 2005].

Le plan de glissement de la dislocation coin est z ($\bar{1}$10), son vecteur de Burgers $\boldsymbol{b}$ est suivant la direction [111]. Les boucles de dislocation se situent devant la dislocation et au-dessous du plan de glissement à une distance H (la distance entre le centre de la boucle et le plan). Dans la direction y, les boucles sont

séparées par une distance L_D. La longueur du chaque segment de la boucle prismatique est *d* qui dépend du nombre de SIAs.

On a donc reproduit la même boite de simulation en DD (Figure 3.16), les axes du repère et les dimensions de la boite étant identiques à ceux des simulations en DM.

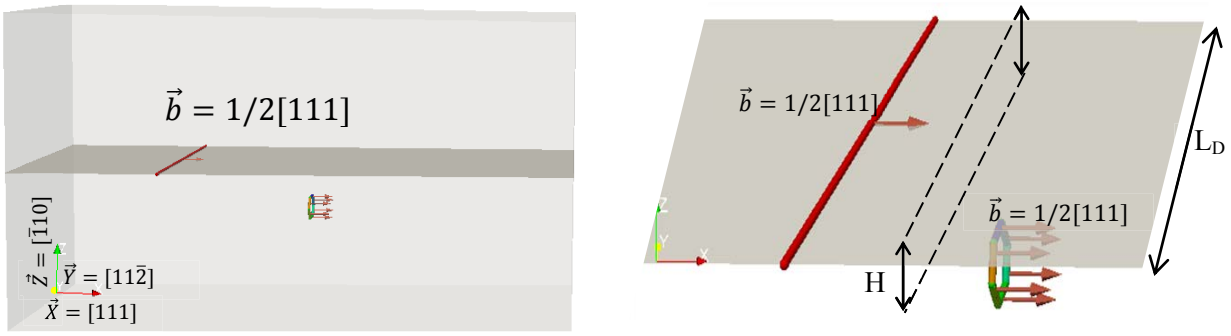


Figure 3.16 Modélisation de l'interaction d'une dislocation coin et d'une boucle [111] en DD

Les mêmes conditions de périodicité sont appliquées dans la direction de la dislocation, à savoir *y* $[11\bar{2}]$ et dans la direction du mouvement de la dislocation *x* [111]. Dans la direction *z* $[\bar{1}10]$, une condition de milieu infini est utilisée.

Vu la 'grande' taille de la boucle par rapport à la boite de simulation élémentaire, on commence par vérifier s'il y a une différence lorsqu'on fait varier le nombre de boucles en répliquant la boite élémentaire selon l'axe y (voir la Figure 3.17). Ce faisant, on vérifie que les conditions aux limites périodiques dans cette direction sont convenablement prises en compte.

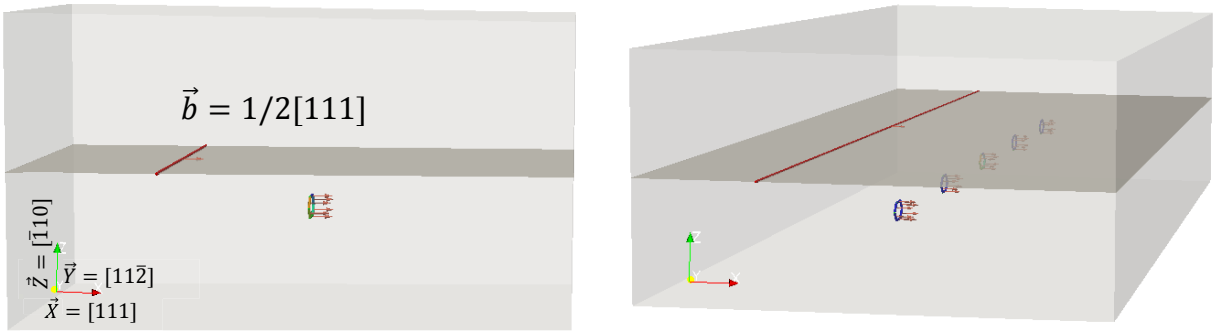


Figure 3.17 Boites de simulation avec différents nombres des boucles

On conserve une même densité de boucles dans les boites de simulation (ce qui revient à augmenter la taille de la boite de simulation selon *y* lorsqu'on ajoute des boucles), puis on mesure la vitesse de la dislocation dans les différentes simulations en appliquant une contrainte de 50MPa.

Sur la Figure 3.18, on constate tout d'abord que la présence d'une boucle d'irradiation fait chuter la vitesse de la dislocation par rapport au cas de simulation d'une dislocation seule, ce qui illustre l'influence

des boucles d'irradiation sur la mobilité de la dislocation. Ensuite, on peut constater, toujours sur cette figure, qu'il existe une légère sensibilité au nombre de boucles présentes dans la boite de simulation quand ce nombre est faible, en l'occurrence une variation d'environ 10% sur la vitesse de la dislocation, ce que l'on peut attribuer à une périodicité imparfaite lorsque le nombre de boucles dans la boite reste faible. Au-delà de 7 boucles, on constate que la vitesse de la dislocation devient insensible au nombre de boucles présentes dans la boite de simulation et semble converger vers le cas d'une seule boucle par boite de simulation. On peut donc considérer que la condition de périodicité est correctement prise en compte dans la direction de la longueur de dislocation, *y*.

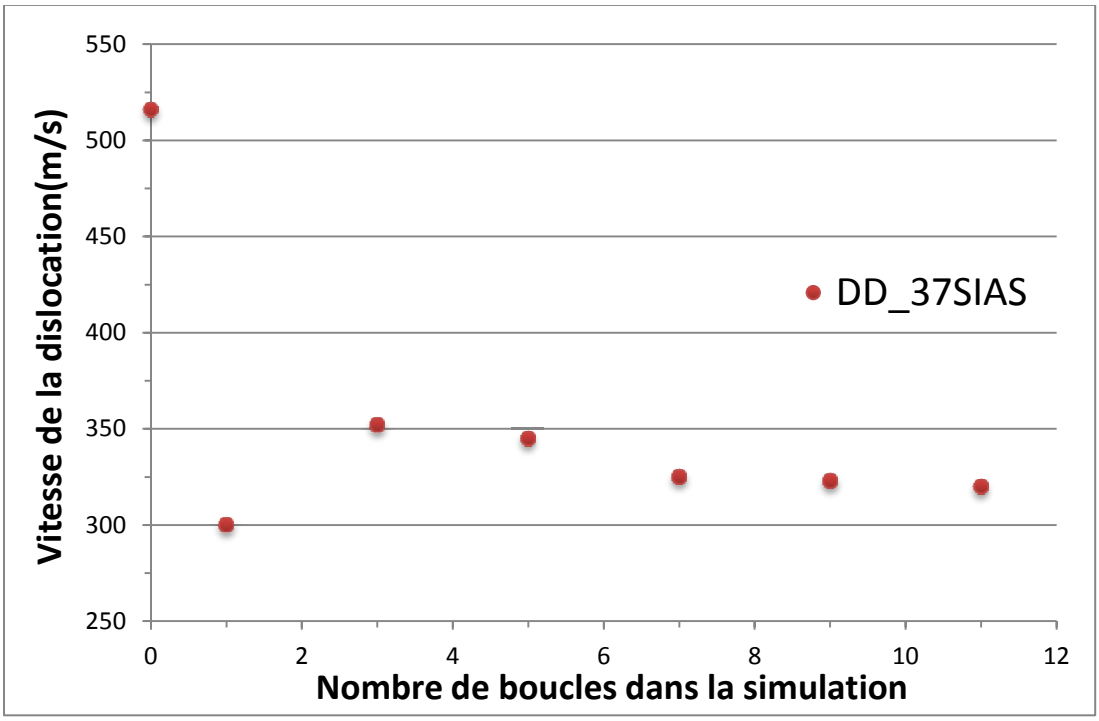


Figure 3.18 Evolution de la vitesse moyenne de la dislocation soumise à une contrainte de 50MPa en fonction du nombre de boucles présentes dans la boite de simulation, tout en conservant une même densité de boucles.

Pour vérifier ensuite que la condition de périodicité est bien programmée selon la direction x, nous avons appliqué la condition de périodicité uniquement dans la direction de la longueur de la dislocation, à savoir *y [11-2]*, puis, nous avons imposé une condition de milieu infini selon *x* et avons ajouté manuellement dans cette direction les deux images les plus proches de la configuration initiale, c'est-à-dire une dislocation devant et une autre derrière avec le même nombre de boucles associées. Les figures ci-dessous illustrent les boites de simulation retenues :

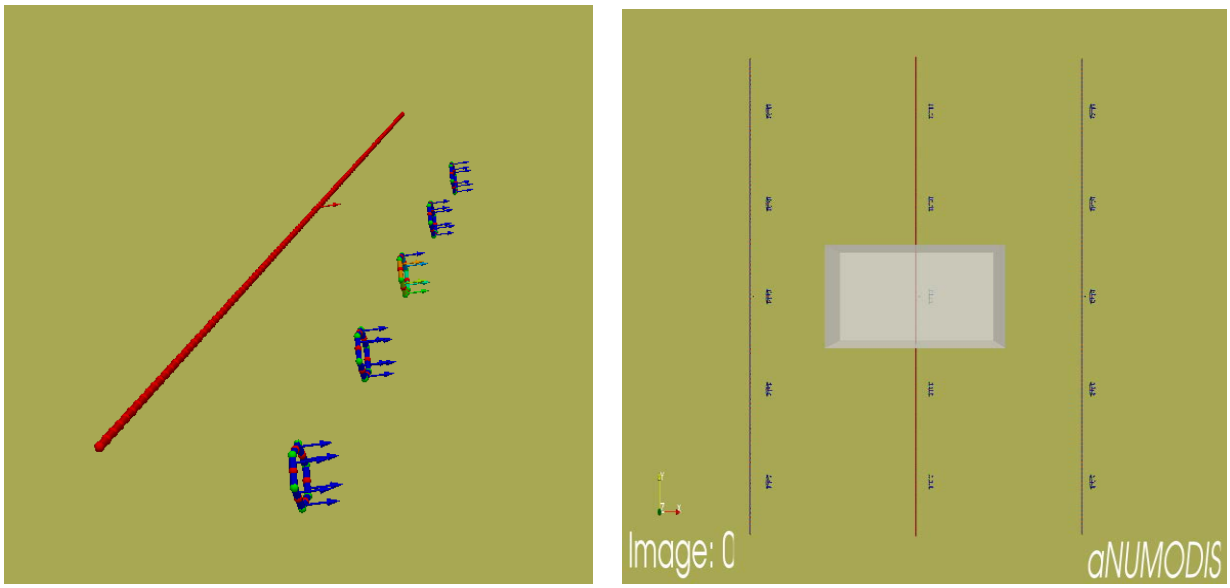


Figure 3.19 Les différentes conceptions de boites pour évaluer l'influence des conditions aux limites périodiques selon la direction x

On reporte sur la Figure 3.20 ci-dessous l'évolution de la vitesse de la dislocation du milieu dans la simulation de trois dislocations en fonction du nombre de boucles présentes dans la direction *y*, et on compare cette évolution à celle obtenue précédemment dans le cas où une seule dislocation était présente selon la direction *x*. On n'observe pratiquement pas de différence entre ces deux configurations, ce qui confirme que la condition de périodicité est bien prise en compte selon la direction x.

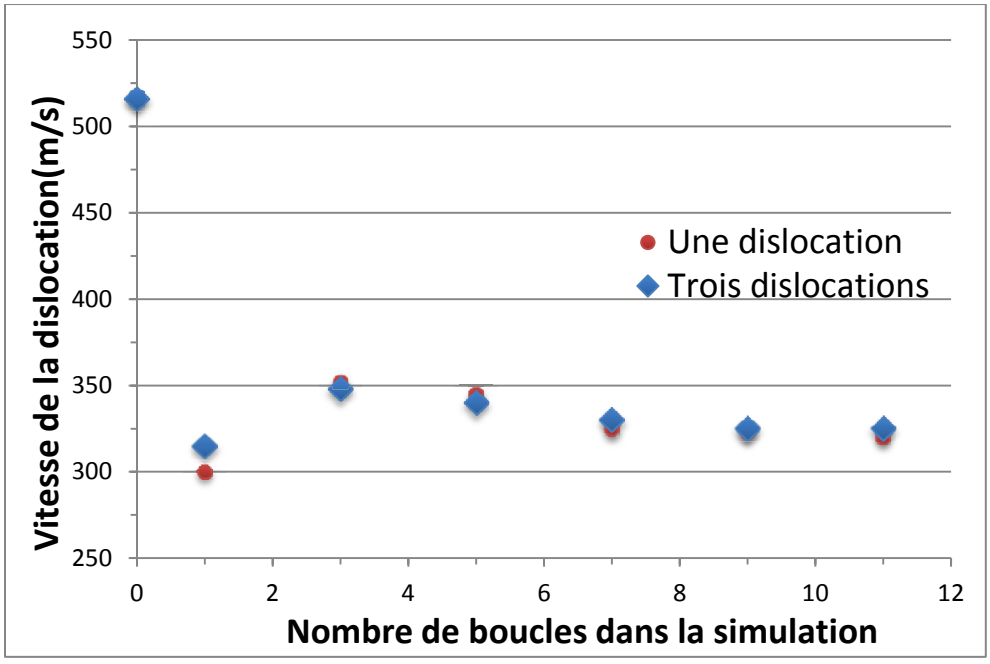


Figure 3.20 Influence du nombre de dislocations dans la direction X sur la vitesse de la dislocation centrale

Par ailleurs, comme cela est précisé dans l'article de Rong [Rong *et al.* 2005], il faut prendre garde dans ce type de simulations à ce que la longueur de la boite dans la direction *x* soit suffisamment grande pour éviter d'importantes interactions entre la dislocation et son image la plus proche. Nous avons donc utilisé la même longueur de 37.5 nm dans la direction *x* que dans les simulations en DM puisque ces simulations atomiques ont montré que cette distance était suffisante pour limiter les effets d'image. Les simulations en DD permettent de vérifier que cette distance selon *x* est effectivement suffisante, simplement en remplaçant les conditions de périodicité selon *x* par une condition de milieu infini et en comparant les résultats obtenus (par exemple ceux tracés sur la Figure 3.20) avec ces deux types de conditions aux limites. Nous avons alors pu constater que les résultats étaient pratiquement confondus (résultats non présentés ici), ce qui valide la taille de la boite de simulation choisie selon *x*.

Après avoir validé le modèle de simulation en DD et notamment l'application des conditions aux limites périodiques, nous avons choisi de n'utiliser qu'une boucle dans les simulations suivantes. Nous avons alors calculé la vitesse de la dislocation en appliquant des niveaux de contrainte différents, puis nous avons comparé les vitesses de dislocations obtenues avec celles de la DM. On constate sur la Figure 3.21 que l'accord entre résultats de DD et DM est très bon.

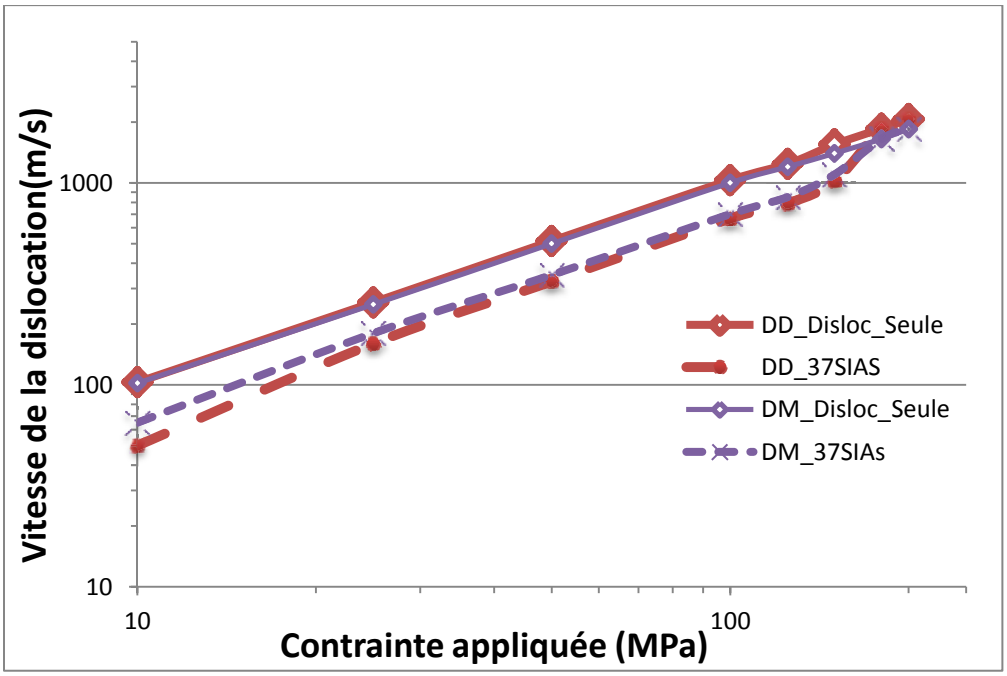


Figure 3.21 Comparaison entre les vitesses de dislocation calculées en DD et en DM en présence ou non d'une boucle d'irradiation

Au-delà d'un certain niveau de contrainte appliqué, ici 150MPa, on observe à la fois en DM et en DD que la boucle ne peut plus suivre la dislocation mais qu'au contraire elle est « décrochée » de la dislocation et reste sur place. La dislocation se déplace alors à la même vitesse qu'en l'absence de boucles. C'est ce que l'on retrouve dans la Figure 3.21 lorsque la courbe représentant la vitesse de la dislocation en présence d'une boucle rejoint la courbe de la vitesse d'une dislocation seule.

En utilisant la loi de mobilité visqueuse linéaire classique reliant la vitesse de la dislocation v à la contrainte effective, nous avons pu obtenir la nouvelle valeur de 'B_{app}' que l'on l'appelle la viscosité apparente et que l'on définit par :

$$v = \frac{<|\tau_{eff}|-\tau_0>b}{B_{app}} \Rightarrow B_{app} = \frac{<|\tau_{eff}|-\tau_0>b}{v}$$

Ici nous avons pris $\tau_0 = 10\ MPa$, comme indiqué dans l'article [Rong *et al.* 2005].

La Figure 3.22 nous montre alors l'effet des boucles sur la mobilité de la dislocation, en fonction du niveau de contraintes appliqué. On observe une bonne cohérence entre les résultats de DD et de DM.

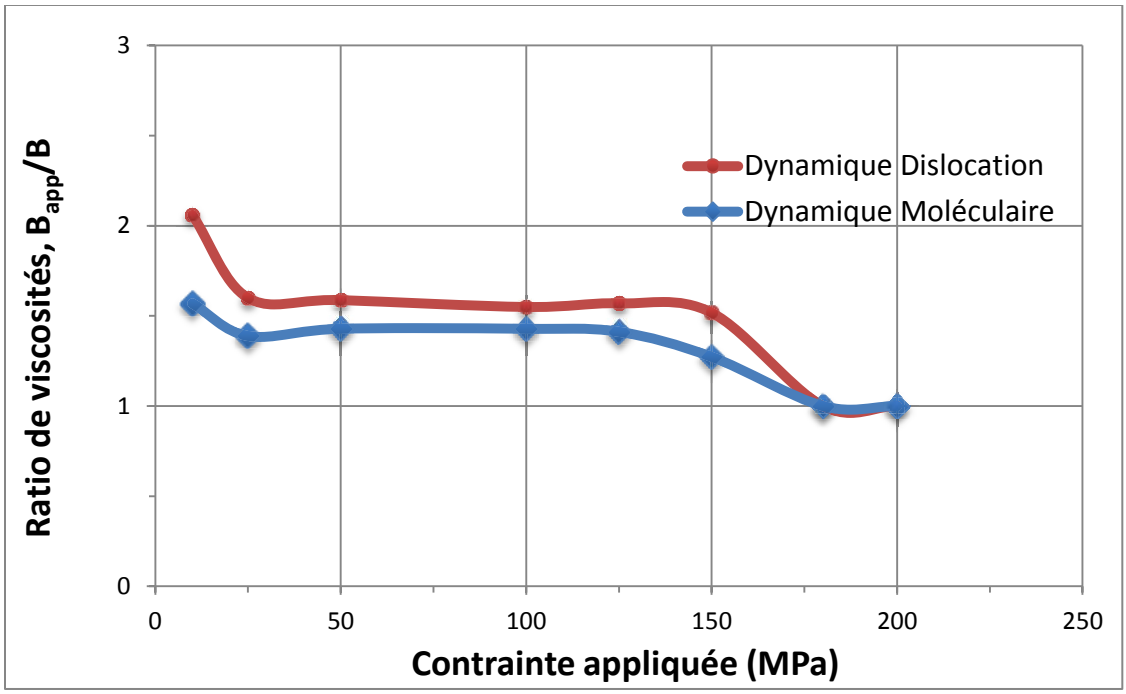


Figure 3.22 Evolution du ratio de coefficients de viscosité B_{app}/B en fonction de la contrainte appliquée. Comparaison entre résultats de DD et de DM.

Conclusion

A partir d'une analyse bibliographique et de premières simulations élémentaires d'interactions entre une dislocation coin et une boucle d'irradiation de type <100>, nous avons pu proposer une liste de systèmes de glissement pour le fer BCC à haute température ainsi qu'un premier jeu qualitatif pour les paramètres de viscosité et de friction de réseau qui interviennent dans la loi de mobilité visqueuse des dislocations.

Nous avons ensuite procédé à une identification quantitative de ces paramètres toujours sur les mêmes simulations élémentaires. Tout d'abord, la contrainte continue d'environ 30MPa qui subsiste après

l'absorption de la boucle par la dislocation nous a permis d'identifier quantitativement les paramètres pour les trois systèmes de glissement les plus glissiles. La contrainte critique nécessaire pour décrocher les dislocations des boucles s'est avérée être particulièrement sensible au paramètre de viscosité des systèmes de glissement <100>{100}, et par conséquent une comparaison entre les contraintes critiques obtenues en DD et en MD a permis d'identifier ce paramètre. Les paramètres de friction de réseau des deux systèmes de glissement les plus sessiles n'ont à l'inverse pratiquement pas d'influence sur les résultats de ces premières simulations, et nous avons donc identifié ces derniers paramètres à l'aide de simulations complémentaires d'interaction entre une dislocation coin et des boucles de vecteur de Burgers $\frac{1}{2}[1\bar{1}1]$.

Le jeu de valeurs obtenu finalement après cette phase d'identification sur des simulations d'interactions élémentaires entre une dislocation et des boucles de type <100> et de vecteur de Burgers $\frac{1}{2}[1\bar{1}1]$ est rappelé dans le Tableau 3.6 ci-dessous:

Tableau 3.6 : Valeur finale des paramètres de la loi de mobilité après identification sur les simulations avec les boucles de type <100> et de vecteur de Burgers $\frac{1}{2}[1\bar{1}1]$

Vecteur de Burgers	Plans	B (10^{-5} Pa*s)	τ_0 (MPa)
½ <111>	{110}	8	10
½ <111>	{112}	8	10
½ <111>	{123}	8	10
<100>	{110}	80	300
<100>	{100}	9000	300

Afin que les résultats de nos simulations de DD soient les plus proches possible de ceux de DM, nous avons dû choisir une valeur de 300MPa pour la contrainte de friction du système <100>{110}, soit une valeur beaucoup plus grande que celle de 10MPa trouvée dans la littérature [Terentyev *et al.* 2012]. Ce résultat illustre certainement une des limites de notre modèle de DD à reproduire la complexité des interactions élémentaires que nous avons étudiées. Néanmoins, nous avons fait le choix de conserver pour la suite de cette étude les valeurs des paramètres reportées dans le Tableau 3.6. Ce choix est motivé par la bonne cohérence à la fois qualitative (les différents mécanismes observés pendant les réactions) et quantitative (la contrainte critique pour absorber les boucles) que l'on a pu observer entre les résultats globaux de DM et de DD.

En fin de chapitre, une simulation des interactions à longue distance et sans contact a été effectuée pour valider notre modèle et notamment l'implantation des conditions aux limites périodiques dans le code de DD. A nouveau, la comparaison entre les résultats de DD et de DM est jugée très satisfaisante.

Bibliographie

[Ackland *et al.* 1997] G.J. Ackland, D.J. Bacon, A.F. Calder, T. Harry, Phil Mag A 75.3 (1997) 713

[Ackland *et al.* 2004] G.J. Ackland, M.I. Mendelev, D.J. Srolovitz, S. Han, A.V. Barashev, J Phys: Condens Matter 16.27 (2004): S2629

[Devincre 1994] B. Devincre, Thèse de Doctorat de l'Université d'Orsay (1994)

[Jaoul 1965] B. Jaoul, Étude de la plasticité et application aux métaux, 1965

[Kuksin *et al.* 2013] A.Y. Kuksin, A.V. Yanilkin, Physics of the solid state, 55(5) (2013) 1010

[Madec *et al.* 2003] R. Madec, B. Devincre, L. Kubin, "Mesoscopic Dynamics in Fracture Process and Strength of Materials", Y Shibutani, H. Kitagawa, Eds (Kluwer, NL-Dordrecht) (2003)

[Mendelev *et al.* 2003] M.I. Mendelev, S. Han, D.J. Srolovitz, G.J. Ackland, D.Y. Sunand, M. Asta, Philos. Mag. 83 (2003) 3977

[Monnet *et al*. 2009] G. Monnet, D. Terentyev, Acta Materialia, 57 (2009) 1416

[Osetsky *et al.* 2003] Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 11 (2003) 427

[Queyreau 2008] S. Queyreau, Thèse de Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie (2008)

[Queyreau *et al.* 2011] S. Queyreau, J. Marian, M.R. Gilbert, B.D. Wirth, Physical Review B 84 (2011) 064106

[Rhee *et al.* 1998] M. Rhee, H.M. Zbib, J.P. Hirth, H Huang, T. de la Rubia, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 6 (1998) 467

[Rodriguez 2011] D. Garcia Rodriguez, Thèse de doctorat, Université de Grenoble Institut Polytechnique de Grenoble (2011)

[Rong *et al.*2005] Z. Rong, Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, Philos.Mag. 85 (2005) 1473

[Shi *et al.* 2014] X.J. Shi, L. Dupuy, B. Devincre, D. Trentyev, L. Vincent, J. nucl. Mater. soumis

[Terentyev *et al.* 2007] D. Terentyev, D. Malerba, D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, Journal of Physics: Condensed Matter, 19 (2007) 456211

[Terentyev *et al.* 2008a] D. Terentyev, D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, J. Phys: Condens. Matter. 20, (2008) 445007

[Terentyev *et al.* 2008b] D. Terentyev, P. Grammatikopoulos, D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, Acta Materialia, 56 (2008) 5034

[Terentyev *et al.* 2010a] D. Terentyev, Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, Acta Materialia, 58 (2010) 2477

[Terentyev *et al.* 2010b] D. Terentyev, Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, Scripta Mat. 62 (2010) 697

[Terentyev *et al.* 2012] D. Terentyev, N. Anento, A. Serra, J. nucl. Mater. 420 (2012) 9

[Urabe *et al.* 1975] N. Urabe, J. Weertman, Materials Science and Engineering, 18 (1975) 41

[Watanabe 2006] R. Watanabe, Materials transactions, 47 (2006) 1886

Chapitre 4 : Application du modèle : Résultats microscopiques et mésoscopiques

Table des matières

Introduction 104

4.1 Confrontation DD-MD dans le cas de nouvelles boucles <100> 104

4.2 Influence de la taille des boucles et de la vitesse de déformation imposée 107

4.2.1 Les boucles de type <100> 107

4.2.2 Boucles de vecteur de Burgers ½< 111 > 115

4.2.3 Bilan des effets de taille et de vitesse de déformation. 117

4.3 Interactions élémentaires entre dislocations vis et boucles d'irradiation 118

4.3.1 Interactions avec des boucles ½< 111 > 118

4.3.2 Interactions avec des boucles <100> 123

4.3.3 Bilan des simulations d'interaction entre une dislocation vis et des boucles d'irradiation ½ <111> et <100> 129

4.4 Simulations massives 129

Conclusion 137

Bibliogrphie 138

Introduction

Après avoir calibré notre modèle sur un certain nombre de résultats de référence obtenus par DM au chapitre précédent, l'objectif de ce dernier chapitre est double : évaluer tout d'abord sa robustesse en nous confrontant à d'autres simulations de DM, puis, l'utiliser pour explorer des configurations nouvelles, non exploitées, voire hors de portée de la DM.

Nous débuterons ce chapitre par la confrontation de nos simulations de DD avec la DM dans le cas des interactions avec des boucles <100> qui n'ont pas été utilisées pour l'identification de nos paramètres.

Nous poursuivrons par l'étude des effets des tailles des boucles et de la vitesse de déformation, à la fois dans le cas des boucles <100> et ½ <111>.

Après avoir étudié un grand nombre d'interactions entre une dislocation *coin* et différentes boucles d'irradiation, nous passerons à des simulations élémentaires impliquant une dislocation *vis* et le même type de boucles. Les simulations avec les boucles de vecteur de Burgers $\frac{1}{2}[1\bar{1}1]$ et les boucles de type <100> seront détaillées séparément.

Enfin, nous appliquerons notre modèle à des simulations massives impliquant un grand nombre de boucles, dans le but d'obtenir la force d'obstacle moyenne de ces défauts lorsqu'ils sont dispersés aléatoirement dans la microstructure balayée par une dislocation. Cette dernière information est en effet une donnée d'entrée importante pour les lois de plasticité cristalline utilisées dans des simulations par éléments finis à l'échelle supérieure.

4.1 Confrontation DD-MD dans le cas des boucles <100>

Dans le précédant chapitre, nous avons identifié les paramètres matériau de notre modèle en exploitant les résultats de trois interactions entre une dislocation coin et des boucles <100> étudiées par DM [Terentyev *et al.* 2008], pour lesquelles nous disposions à la fois du détail des interactions topologique ainsi que des courbes contrainte-déformation. Ces interactions sont cependant loin de représenter l'ensemble des variantes cristallographiques et topologiques possibles, reportées, plus synthétiquement, dans ce même article [Terentyev *et al.* 2008]. L'étude par DD de ces configurations représente ainsi un test de robustesse particulièrement important pour notre modèle, puisqu'elles n'ont pas servi au calibrage des paramètres du modèle.

La figure ci-dessous résume, de façon brute, toutes les courbes de contrainte-déformation obtenues avec le code NUMODIS et pour les différents types d'interactions dislocation-boucle:

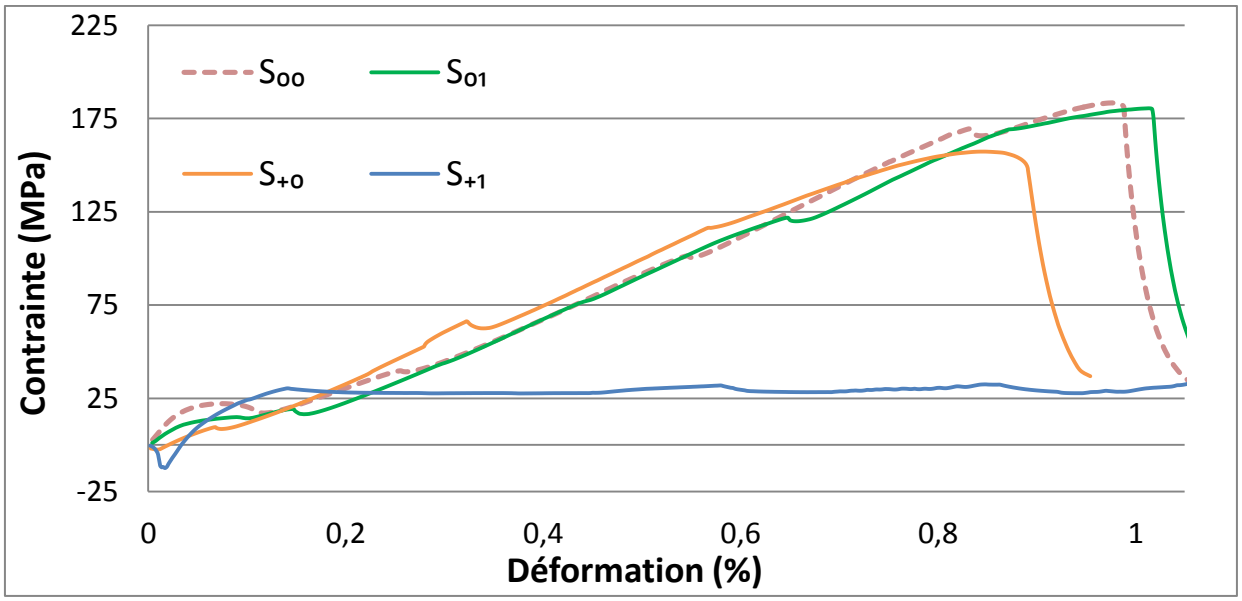


Figure 4.1 Courbes contrainte-déformation obtenues dans NUMODIS lors de l'interaction entre une dislocation coin et différents types de boucles <100>

La contrainte critique pour chaque interaction a ensuite été extraite et confrontée directement aux valeurs obtenues en DM [Terentyev *et al.* 2008] dans la figure suivante :

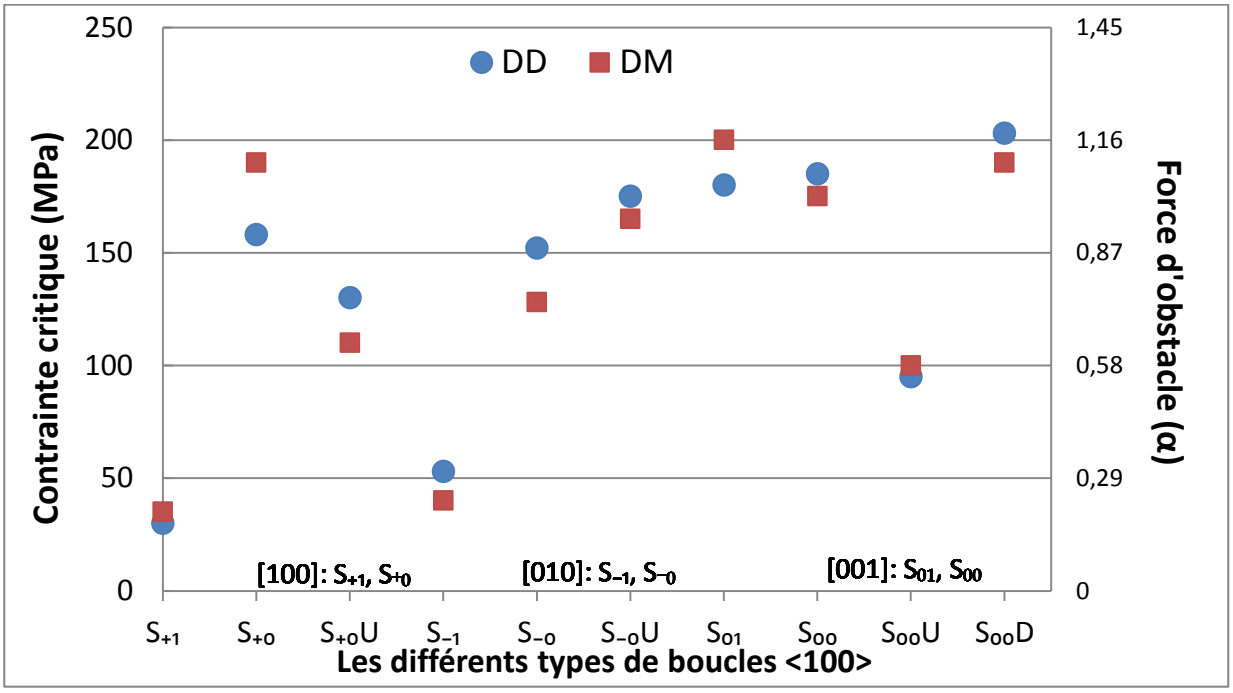


Figure 4.2 Comparaison entre résultat de DD et de DM : contraintes critiques pour les différents types de boucle <100> (axe de gauche) et force d'obstacle calculée par l'équation (37) présentée un peu plus loin dans cette partie (axe de droite)

Cette Figure 4.2 montre un bon accord quantitatif entre DD et DM pour la totalité des interactions étudiées avec un écart maximum d'environ 17%, ce qui valide l'identification des paramètres réalisée au chapitre précédent.

Cette bonne cohérence de nos simulations avec la DM est toutefois entachée par le résultat obtenu pour l'interaction S_{00} (cf. courbe pointillée de la Figure 4.1) où les mécanismes topologiques observés dans nos simulations diffèrent de ceux obtenus en DM comme indiqués dans la Figure 4.3 ci-dessous.

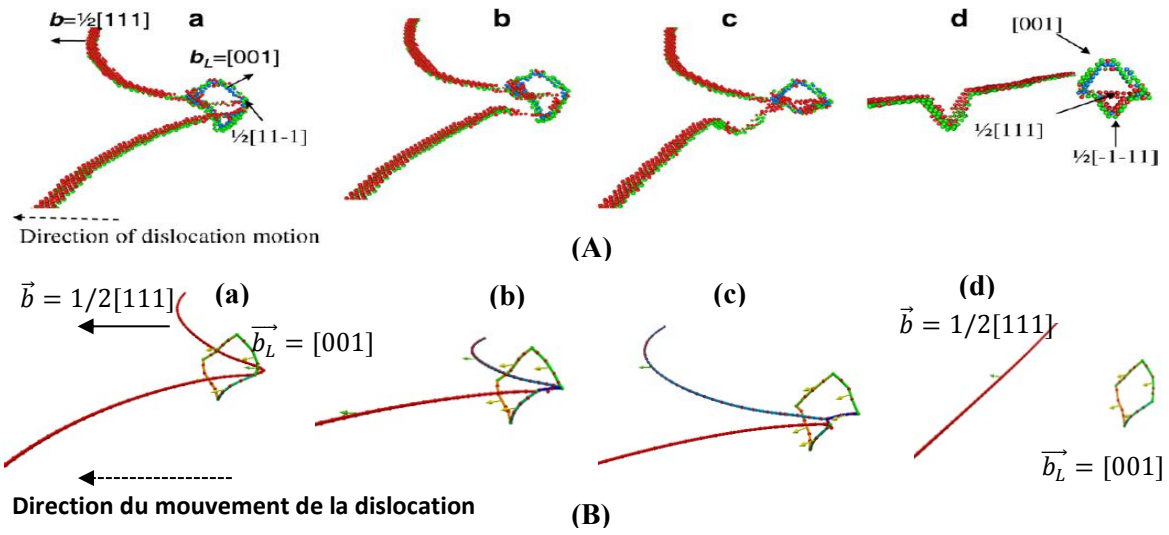


Figure 4.3 Principales étapes de la réaction S_{00} en DM [Terentyev *et al* 2008] (A) et en DD (B)

Si le mécanisme observé en DD est un cisaillement simple assez classique de la boucle, les interactions observées en DM sont beaucoup plus subtiles : le point de contact observé entre la boucle et la dislocation évolue par la formation d'une jonction de vecteur de Burgers $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ (voir Figure 4.3 A-a) le long de la direction [010] de la boucle. Notons que, cette direction [010] se situant hors du plan de glissement $(1\bar{1}0)$ de la dislocation incidente, la formation de cette jonction est géométriquement rendue possible par la formation simultanée d'un segment de vecteur de Burgers $\frac{1}{2}[111]$ dans le plan $(10\bar{1})$. Ce dernier segment, particulièrement visible sur la Figure 4.3 A-b peut s'apparenter à un mécanisme de glissement dévié d'une partie de la dislocation incidente depuis le plan initial $(1\bar{1}0)$ vers le plan $(10\bar{1})$.

Du point de vue numérique, le traitement d'un tel mécanisme ne peut pas être reproduit en l'état dans le code NUMODIS. En effet, d'un point de vue topologique, il faudrait en effet autoriser la *scission d'un nœud multiple* (0) *en trois nouveaux nœuds* (V0, V1 et V2) *séparés par deux nouveaux segments* (voir Figure 4.4). Le premier segment J1=[V0V2] aurait ici pour vecteur de Burgers $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$, tandis que le second J2=[V1V2] aurait pour vecteur de Burgers $\frac{1}{2}[111]$ comme le segment rouge auquel il est relié mais aurait un plan de glissement différent de ce dernier. Ce mécanisme n'est malheureusement pas modélisable avec nos simulations aujourd'hui. Comme nous l'avons vu au chapitre 2, seule la scission d'un nœud multiple en deux nouveaux nœuds est considérée jusqu'à présent dans NUMODIS.

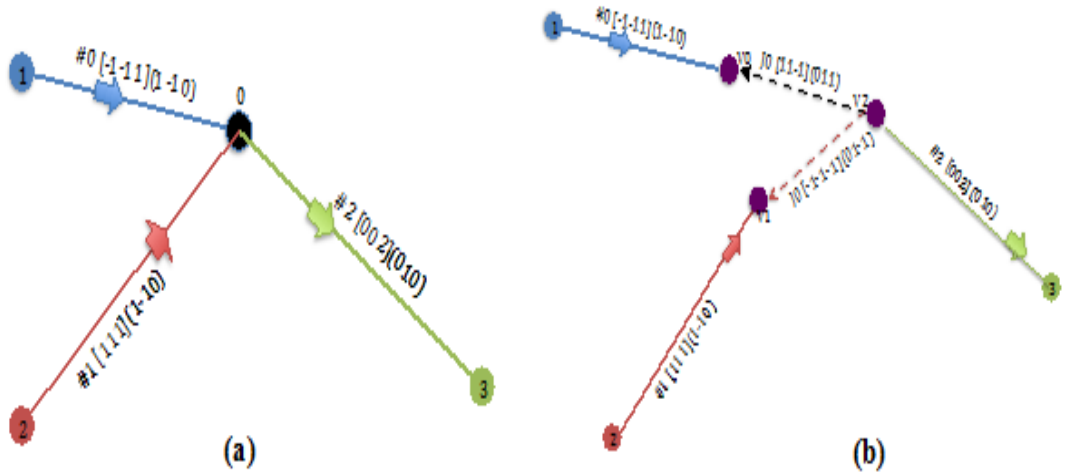


Figure 4.4 Présentation d'un mécanisme dédié à l'algorithme de 'split à trois nœuds'

La prise en compte de ce mécanisme de scission en trois nœuds est toutefois théoriquement possible dans le cadre de l'algorithme présenté au chapitre 2, moyennant d'étendre le champ d'évolutions possibles d'un nœud multiple à ce type de configuration. Des travaux en ce sens, auxquels j'ai contribué, sont réalisés dans le cadre du développement du code NUMODIS depuis plusieurs années. Néanmoins la réalisation de cet algorithme est particulièrement complexe et n'a pu aboutir dans le temps de ma thèse.

4.2 Influence de la taille des boucles et de la vitesse de déformation imposée

Dans le précédent chapitre, nous avons étudié par DD les interactions entre une dislocation coin et des boucles de type <100> et de vecteur de Burgers ½[1$\bar{1}$1] en se plaçant dans des conditions similaires à des simulations de DM. Toutes ces simulations étaient réalisées en figeant à la fois la taille des boucles et la vitesse de déformation imposée. Nous nous intéressons désormais à l'effet de ces deux paramètres sur les résultats de nos simulations. Du fait d'un nombre de degrés de liberté bien moindre, l'étendu des domaines de tailles de boucles et de vitesses de déformation que l'on peut simuler avec la DD est bien plus important que celui accessible en DM. En outre, en ce qui concerne au moins la vitesse de déformation, la DD permet de s'approcher des conditions de déformation réelles.

4.2.1 Boucles de type <100>

Les conditions principales de simulation sont rappelées sur la Figure 4.5.

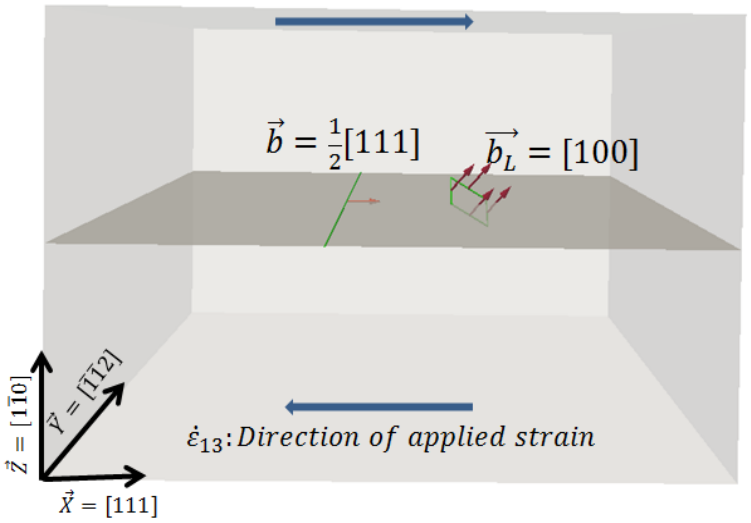


Figure 4.5 Conditions de simulation pour l'étude de l'effet de taille des boucles lors de l'interaction entre une dislocation coin et des boucles de type [100]

4.2.1.1 *Effets de taille*

Des boucles de tailles allant d'environ 1 nm à 4 nm ont été considérées, la « taille » étant ici la longueur des côtés de nos boucles considérées carrées. Nous reportons sur la Figure 4.6 l'évolution de la contrainte critique d'écoulement en fonction de cette taille de boucle.

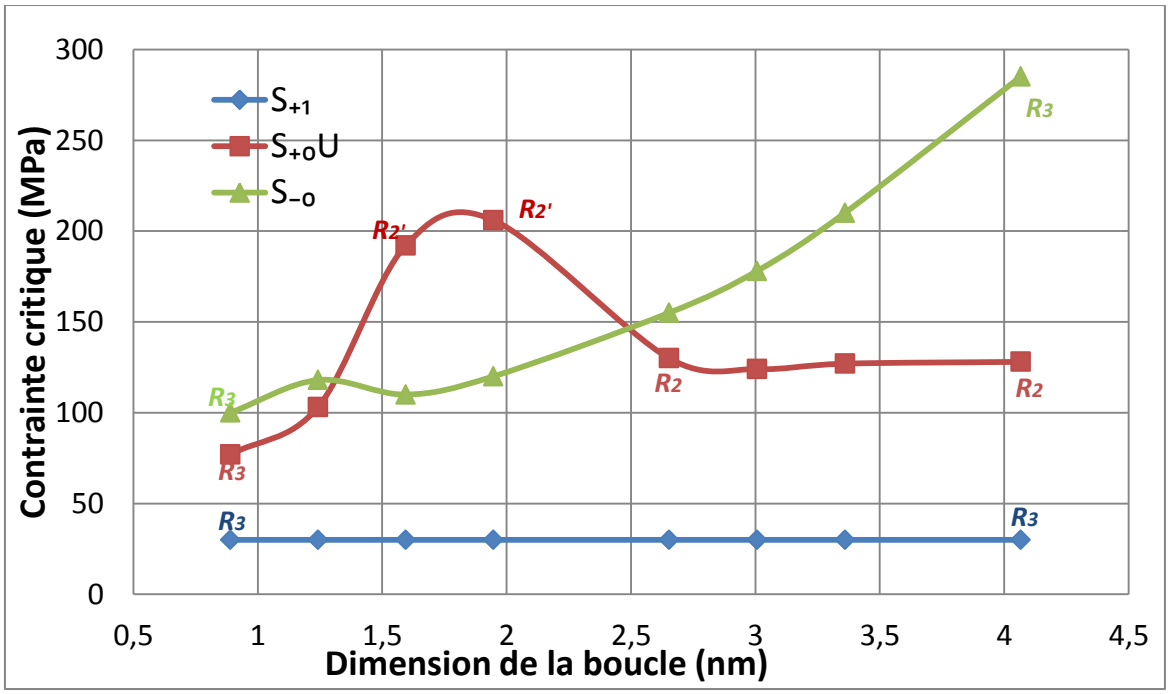


Figure 4.6 Effet de la taille des boucles sur la contrainte critique d'écoulement et le type de réaction lors des interactions entre une dislocation coin et une boucle de type <100>. *R3*, *R2'* et *R2* désignent différents mécanismes d'interactions.

La contrainte critique et la réaction entre une dislocation coin et une boucle de type S_{+1} restent inchangées quelle que soit la taille de la boucle utilisée dans la simulation. Ceci peut s'expliquer par le fait que la réaction entre la boucle et la dislocation est énergétiquement très favorable et a donc lieu spontanément sans besoin de contraintes supplémentaires (voir la Figure 4.7 ci-dessous).

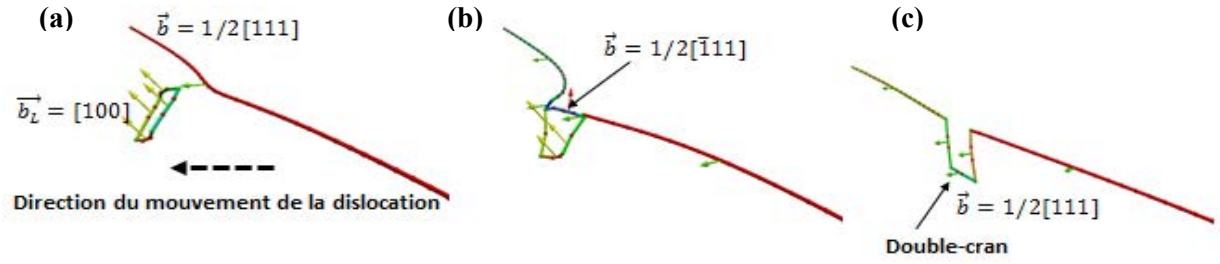


Figure 4.7 Etapes principales de la réaction entre une dislocation coin et une boucle de type S_{+1}

La dislocation est attirée tout au début par la boucle (Figure 4.7-a) et puis forme un nouveau segment de vecteur de Burgers $\frac{1}{2}[\bar{1}11]$ après le premier contact avec la boucle (Figure 4.7-b). Ce nouveau segment mobile peut très facilement descendre et absorber le reste de la boucle en formant un double-cran de même vecteur de Burgers que la dislocation (Figure 4.7-c) sous les champs de contraintes internes. Une fois terminée la réaction de contacte, la mobilité du double-cran formé ne dépend pas de la taille de ce dernier puisque la mobilité des segments de dislocation est la même dans tous les plans de glissement.

Pour la configuration d'interaction S_{-0}, le type de réaction (voir Figure 4.8) reste identique à celui présenté dans le chapitre précédant. On constate toutefois que la contrainte critique augmente avec la taille de la boucle. Cette augmentation de contrainte critique peut être liée à l'augmentation du temps nécessaire pour faire descendre le nouveau segment [100] formé (voir Figure 4.8-b) après la réaction initiale lorsque la taille de la boucle augmente : le nouveau segment doit parcourir plus de distance en un même laps de temps si on travaille à vitesse de déformation constante.

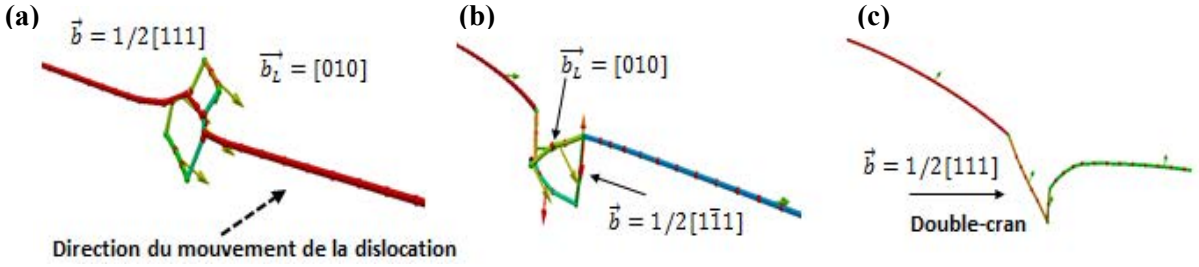


Figure 4.8 Etapes principales de la réaction *R3* entre une dislocation coin et une boucle de type S_{-0}

Sur la Figure 4.6 ci-dessus, on observe que la contrainte critique d'écoulement nécessaire pour détacher une dislocation d'une boucle de type $S_{+0}U$ passe par un maximum pour une taille de boucle aux alentours de 2 nm. Une analyse des réactions impliquées selon la taille de la boucle montre une évolution des mécanismes (notées *R3*, *R2'* et *R2*) que nous détaillons ci-dessous.

Quand la taille de la boucle est suffisamment petite, celle-ci est absorbée par la dislocation. La Figure 4.9 ci-dessous illustre cette réaction *R3*, qui est similaire à celle observée pour la boucle de type S_{-0}.

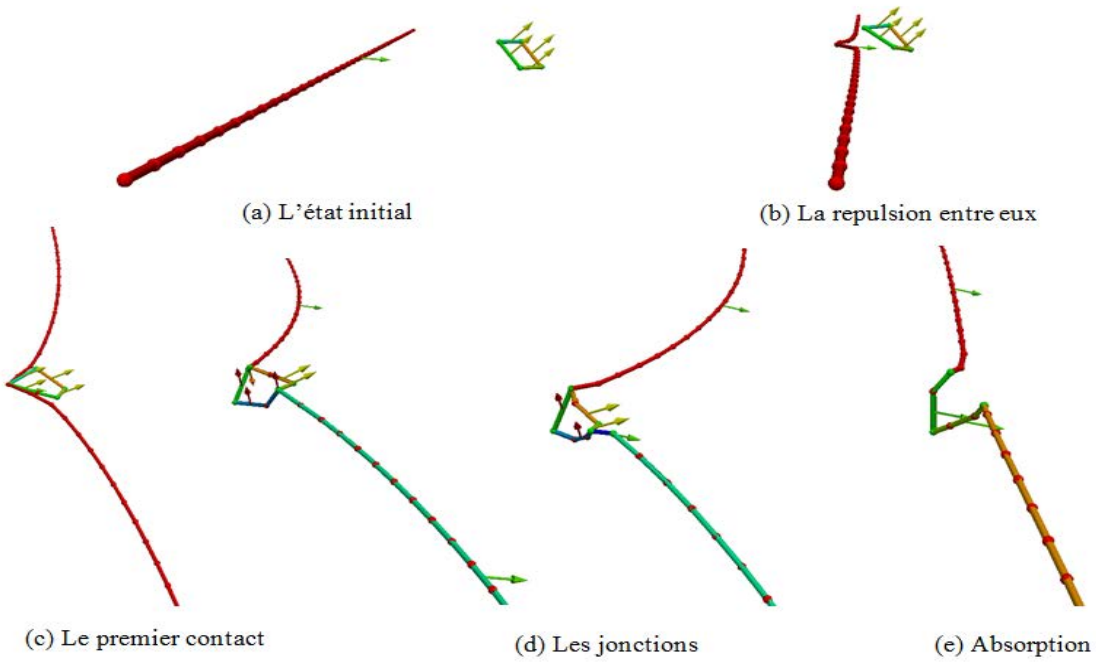


Figure 4.9 La réaction *R3* entre une dislocation et une boucle de type $S_{+0}U$ de longueur 1,24 nm

Lorsque la taille de boucle augmente, la réaction obtenue (ici nommée R_2' - voir Figure 4.10) se rapproche de la réaction R_2 décrite au chapitre précédent (voir aussi Figure 4.12). La contrainte critique passe alors par un maximum.

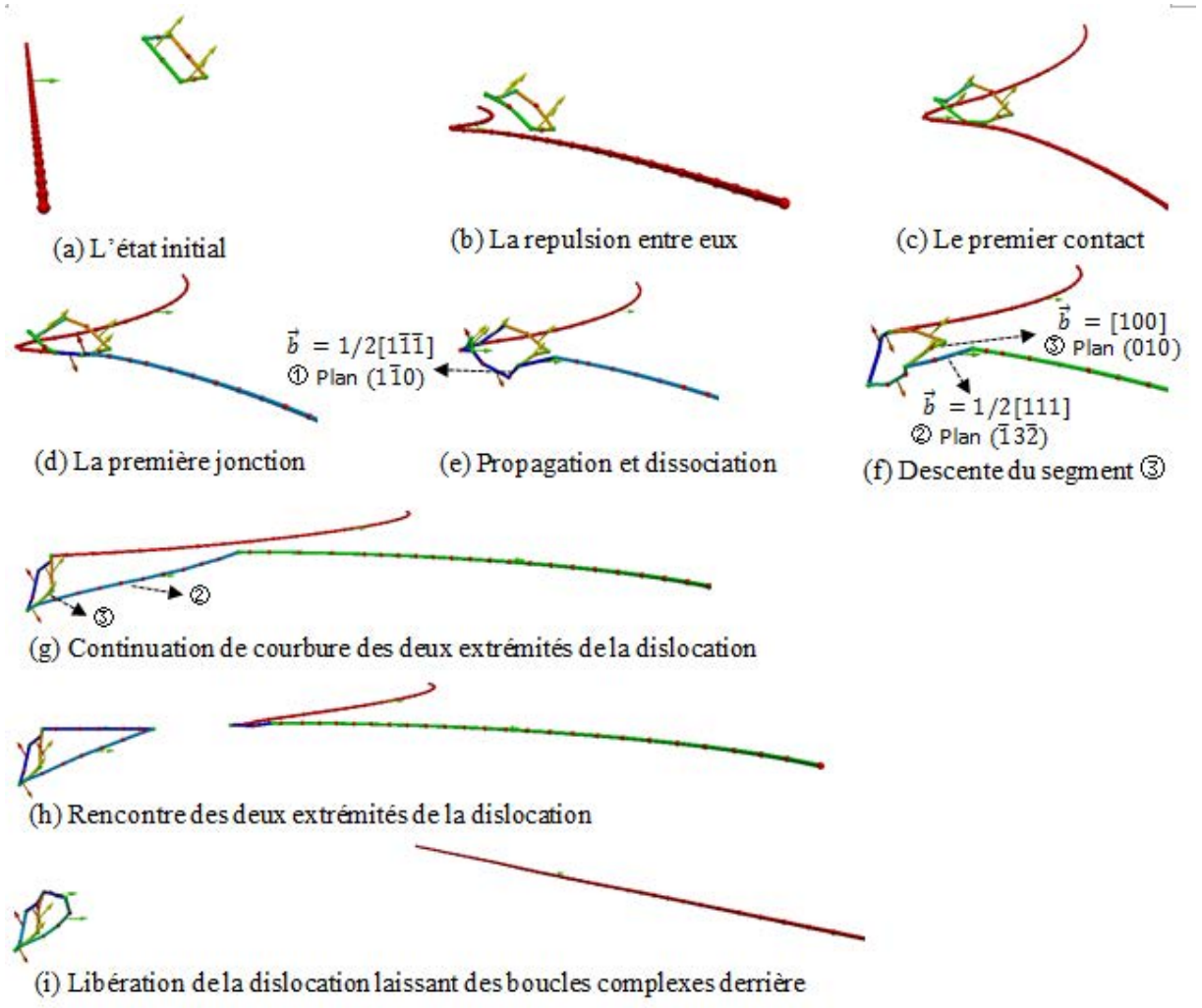


Figure 4.10 La réaction R_2' pour la boucle de type $S_{+0}U$ avec une longueur de segment égale à 1,9 nm

La réaction R_2' se différencie de la réaction R_2 (Page 30) décrite au chapitre précédant à partir de l'étape (e) de la Figure 4.10. Le segment situé en haut de la boucle descend jusqu'au plan de glissement de la dislocation et réagit avec elle. Dans le même temps, on constate sur la Figure 4.11 qu'au lieu de propager le segment ① du vecteur de Burgers ½[1$\bar{1}\bar{1}$] dans un plan ($\bar{1}\bar{1}$0), deux nouveaux segments apparaissent, le segment ② de vecteur de Burgers ½[111] dans un plan ($\bar{1}3\bar{2}$) et un segment ③ identique au segment initial de la boucle (vecteur de Burgers [100] dans un plan (010)). La dislocation étant plus mobile dans le système ½[111] ($\bar{1}3\bar{2}$) que dans le système <100>{100}, le glissement du segment ② est plus rapide que la descente du segment ③ (voir Figure 4.10-g). Finalement, la dislocation se libère quand les deux branches de la dislocation se rejoignent. Elle laisse alors derrière elle des boucles complexes (voir Figure 4.10-h et Figure 4.10-i).

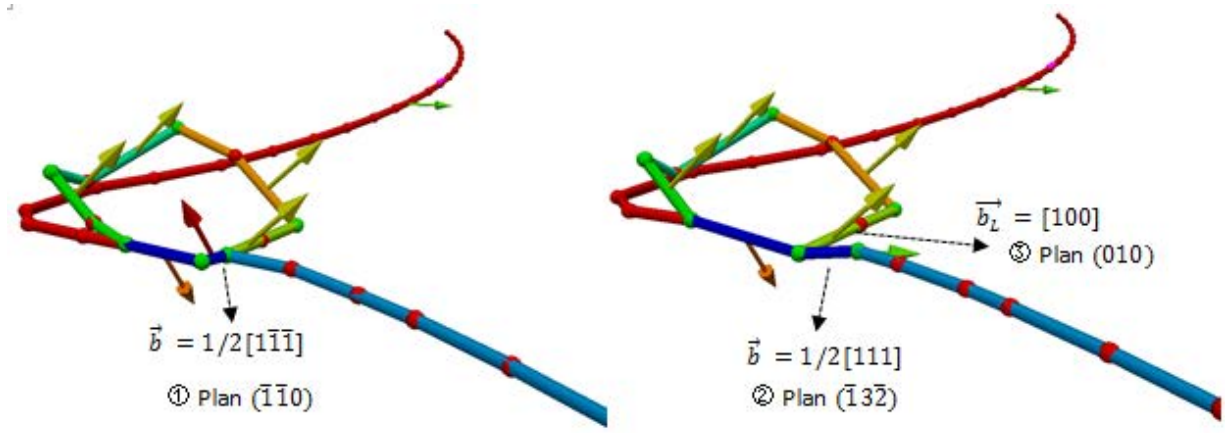


Figure 4.11 Une vue détaillée de la dissociation du segment pendant la réaction R_2'.

Au-delà d'une certaine taille, environ 2,5nm (voir Figure 4.6), nous constatons que ni le mécanisme d'interaction ni la contrainte critique n'évoluent. Le pic de contrainte critique lors de la réaction R_2' est, de fait, à un temps caractéristique plus important que ceux des réactions R_3 et R_2.

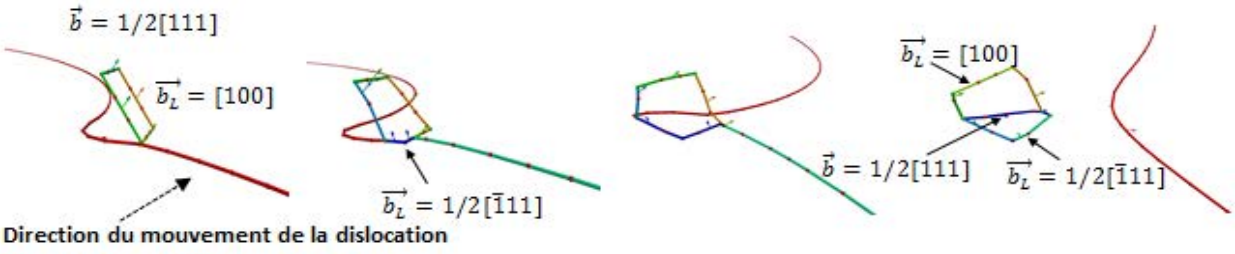


Figure 4.12 Réaction R_2 impliquant une boucle en configuration $S_{+0}U$ de longueur 2,6 nm

On note en conclusion de cette partie que la taille des boucles intervient, sur la contrainte critique de franchissement par une dislocation, selon la nature de la configuration cristallographique : certaines configurations (ex : S_{-0}) donnent lieu à des contraintes critiques évoluant avec la taille de la boucle, tandis que d'autres (ex : S_{+1}) sont au contraire insensibles à cette taille. Cette constatation fournit de fait des indications intéressantes à destination de la plasticité cristalline lorsqu'il s'agira de discuter des équations de durcissement induit par les boucles en fonction de leur taille.

4.2.1.2 Effet de la vitesse de déformation

Nous avons ensuite étudié les effets de la vitesse de déformation sur les boucles carrées de 169 SIAs (soit une taille d'environ 2,6 nm) en appliquant les mêmes conditions que précédemment. La Figure 4.13 ci-dessous montre l'évolution de la contrainte critique en fonction de la vitesse de déformation imposée, laquelle varie de $10^6 s^{-1}$ à $5 * 10^7 s^{-1}$ (soit une vitesse moyenne de la dislocation d'environ 5 m/s à 250 m/s).

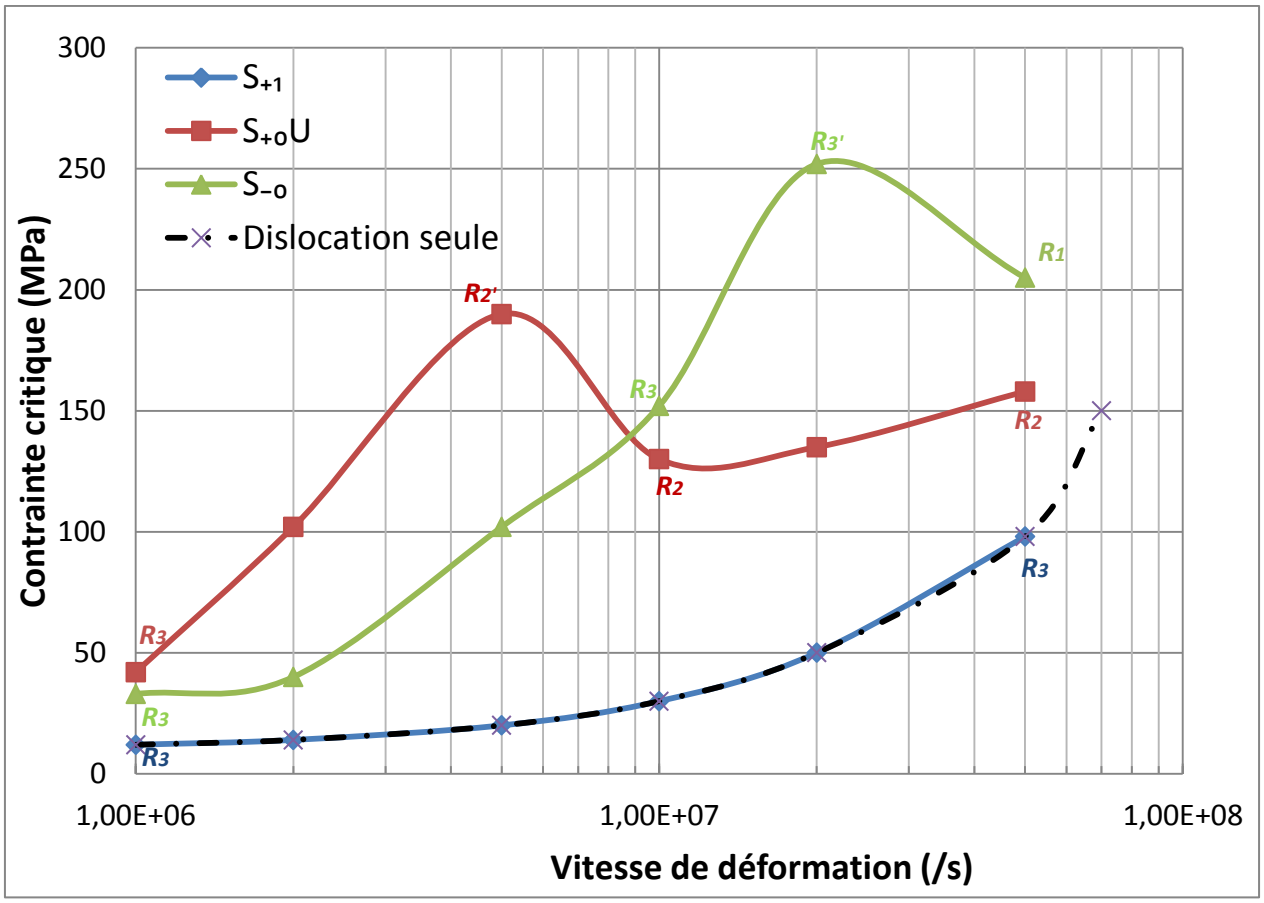


Figure 4.13 Effets de la vitesse de déformation sur les types de boucle <100>

Nous constatons que pour la configuration de boucle S_{+1}, les mécanismes d'interaction n'évoluent pas avec la vitesse de déformation. La contrainte critique mesurée pour S_{+1} correspond quasiment, de fait, à la contrainte d'écoulement de la dislocation isolée pour la vitesse de déformation appliquée (voir Figure 4.13). Nous pouvons au passage considérer cette contrainte comme une référence permettant de mesurer le durcissement des autres types de boucles.

Les contraintes critiques avec les boucles de type $S_{+0}U$ et S_{-0} présentent toutes les deux un maximum en fonction de la vitesse de déformation. Ce maximum s'accompagne d'un changement de mécanisme, similaire à celui observé dans la section précédente. Quand la vitesse de déformation est suffisamment basse, on observe une réaction de type R_3 pour les trois types de boucles. Quand la vitesse de déformation est plus élevée, on retrouve d'abord un mécanisme R_2' puis un mécanisme de réaction R_2 pour la configuration $S_{+0}U$. Quant à la configuration S_{-0}, un cisaillement simple de la boucle (mécanisme R_1) se produit lorsque la vitesse de déformation devient très grande, laissant des boucles inchangées après le passage de la dislocation (Figure 4.14). L'observation de ce type de transition vers le mécanisme R_1 a déjà été reportée dans des études précédentes par DM dans différents matériaux (ex : [Nogaret 2007])

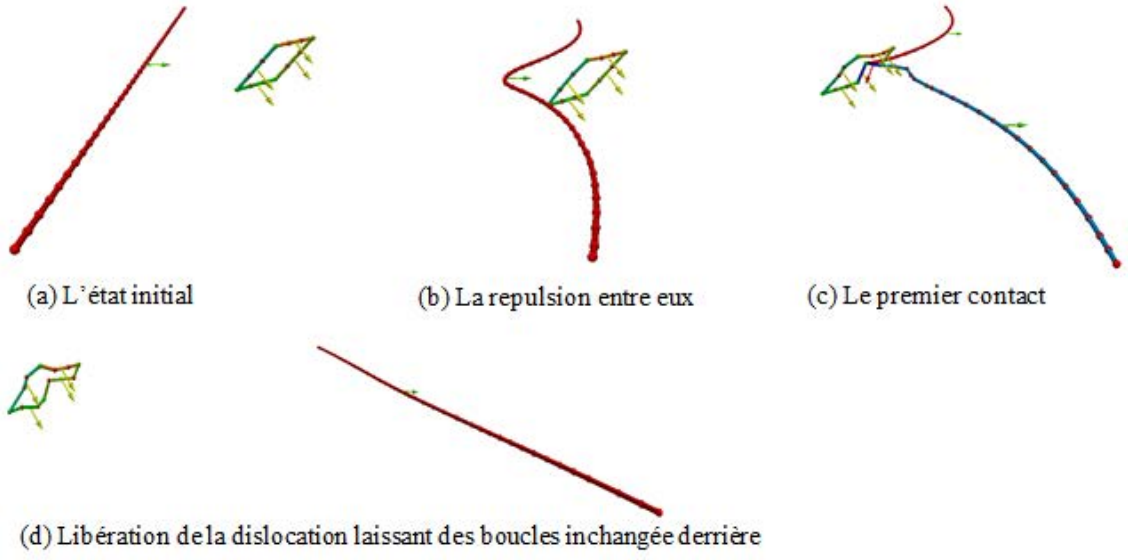


Figure 4.14 Réaction R_1 pour le type de boucle S_{-0} quand la vitesse de déformation est grande $5.10^7 s^{-1}$

Une telle transition peut s'expliquer assez simplement. Quand la vitesse de déformation appliquée est grande, le segment situé en haut de la boucle n'a pas suffisamment de temps pour se courber et se placer pour interagir avec la dislocation incidente avant que ces deux dislocations ne se croisent. La jonction potentielle ne peut alors se faire et la dislocation mobile peut se détacher sans trop de difficulté de la boucle.

Notons que, pour la configuration S_{-0}, nous avons observé une nouvelle configuration de réaction, appelée R_3' (voir Figure 4.15) lors de la transition entre réaction R_3 et réaction R_1. Elle présente de fortes similarités avec la réaction R_3, mais s'en distingue légèrement à l'étape (d) de la Figure 4.15, c'est à dire lorsque les deux segments de la dislocation parviennent à se rejoindre avant que la partie supérieure de la boucle n'ait eu le temps de descendre complètement (voir Figure 4.8).

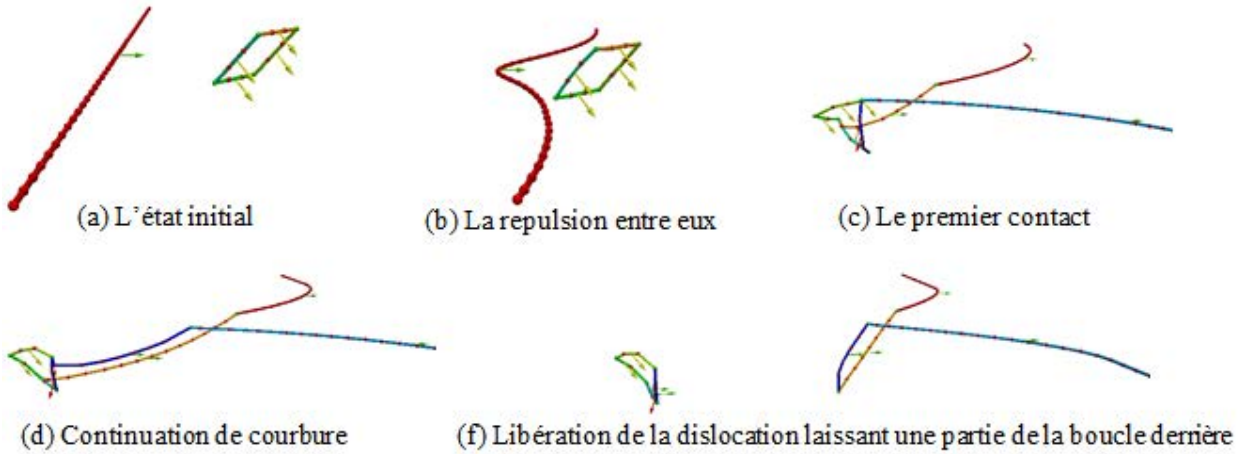


Figure 4.15 Les étapes principales de la réaction R_3' pour S_{-1} avec $\dot{\varepsilon} = 2.10^7 s^{-1}$

4.2.2 Boucles de type ½< 111 >

Une étude similaire à celle que nous venons de présenter pour les boucles <100> a été réalisée dans le cas de l'interaction d'une dislocation coin et une boucle de vecteur de Burgers ½[1$\bar{1}$1]. Notons que nous bénéficions pour ce type de boucle de simulations de référence effectuées par DM [Terentyev *et al.* 2010].

4.2.2.1 Effet de la taille des boucles

Nous avons ici étudié l'influence de la taille de boucles pour des tailles allant de 1 à 4 nm en nous plaçant, en ce qui concerne les dimensions caractéristiques et la vitesse de sollicitation, dans les mêmes conditions que pour les simulations réalisées en section 3.3. Les résultats de ces simulations sont synthétisés sur la Figure 4.16, accompagnés de la mention désignant le type de réaction (R_s, R_{ref}, R_b) observés au chapitre précédent.

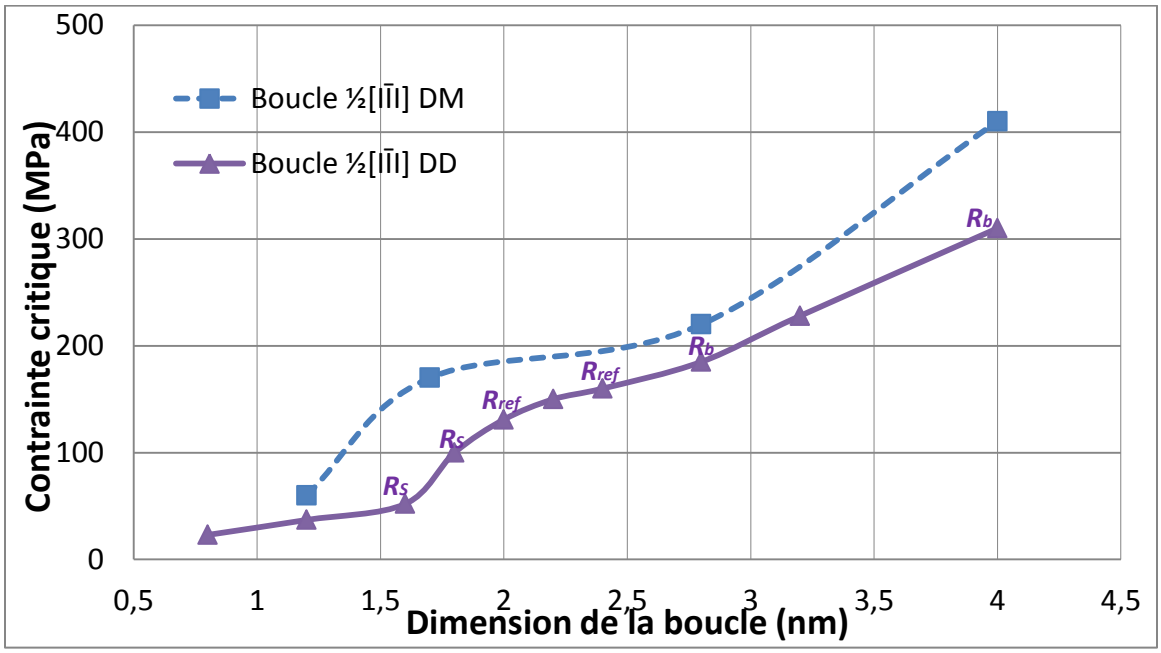


Figure 4.16 Evolution de la contrainte critique de décrochement des dislocations coins en fonction de la taille des boucles de ½[1$\bar{1}$1]. Comparaison entre résultats de simulation par DM [Terentyev *et al.* 2010] et par DD.

Nous constatons que la contrainte critique de franchissement augmente avec la taille de la boucle. Elle ne présente toutefois par d'extremums comme c'était le cas pour les boucles de vecteur de Burgers <100> et de type $S_{+0}U$ (Figure 4.6).

La comparaison de cette courbe avec celle obtenue par DM [Terentyev *et al.* 2010] est tout à fait satisfaisante, puisque notre modèle reproduit les niveaux de contraintes et l'influence de la taille de boucle avec une différence d'environ 15% (voir Figure 4.16 ci-dessus).

Notons que l'évolution de la contrainte critique avec la taille de boucle n'est pas linéaire. Ainsi, l'augmentation de la contrainte critique en fonction de la taille de boucle est plus importante lorsque cette taille est comprise entre 1,5 et 2,0 nm ou lorsqu'elle est supérieure à 3 nm. Cet effet est également observé

en DM, quoique pour des tailles légèrement différentes (1,2 à 1,7 nm) et peut être reliée à des changements de type de réaction comme indiqués sur la Figure 4.16. Nous avons enfin observé que les boucles de plus grandes tailles n'était pas complètement absorbées (Figure 4.17), ce qui est là-encore en accord avec les résultats de DM.

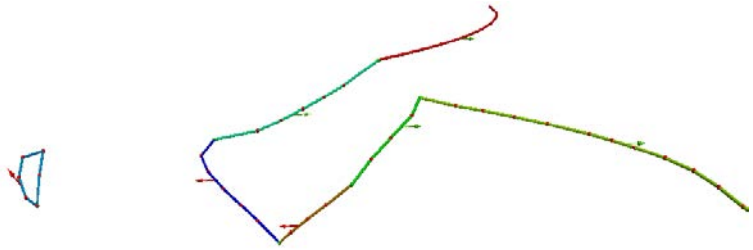


Figure 4.17 Absorption partielle d'une boucle ½[1$\bar{1}$1] avec une dimension de taille égale 4 nm.

4.2.2.2 Effet de la vitesse de déformation

L'effet de la vitesse de déformation a été exploré pour les boucles ½[1$\bar{1}$1] dans une gamme allant de $10^6 s^{-1}$ à $10^8 s^{-1}$ (soit une vitesse de la dislocation de 3,6 m/s à 360 m/s) pour deux tailles de boucles différentes. : une boucle de taille 2,0 nm et une autre de 2,3 nm. Les résultats de cette étude sont présentés dans la Figure 4.18 ci-dessous.

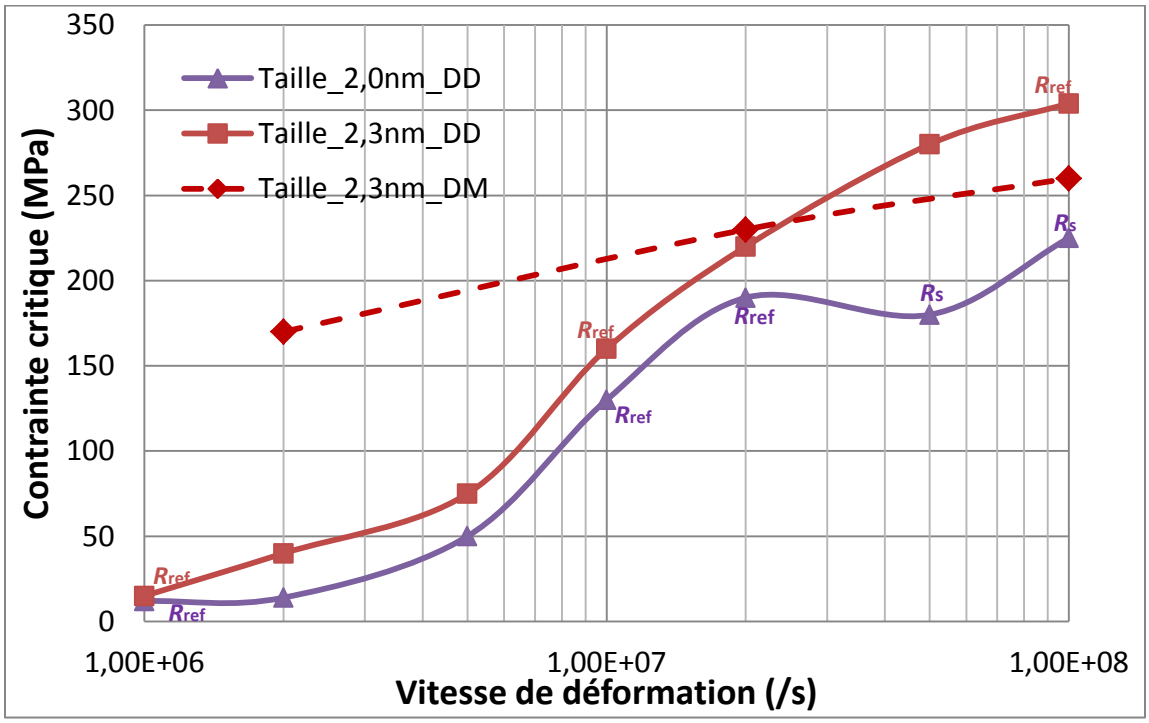


Figure 4.18 Effets de la vitesse de déformation sur la boucle de vecteur de Burgers ½[1$\bar{1}$1] en DD et en DM [Terentyev *et al.* 2010]

Comme nous l'avons déjà vu pour d'autres réactions, notre modèle prévoit une augmentation de la contrainte critique de franchissement de la boucle lorsque la vitesse de déformation augmente. Nous

retrouvons par ailleurs que les boucles de taille 2,3 nm donnent lieu à des contraintes toujours supérieures à celles des boucles de taille 2,0 nm. Les interactions pour la boucle de taille 2,3 nm sont des réactions de type R_{ref} pour l'ensemble du domaine de vitesse exploré, tandis qu'un changement de réaction est observé pour les boucles de 2,0 nm lorsque la vitesse de déformation devient supérieure à $\dot{\varepsilon} = 5.10^7 s^{-1}$.

La comparaison entre DM et de DD montre une cohérence satisfaisante dans le domaine des grandes vitesses de déformation, $\boldsymbol{\dot{\varepsilon} > 1.10^7 s^{-1}}$ (vitesse de la dislocation supérieure à 36 m/s). Cependant, à plus basse vitesse, les contraintes critiques obtenues en DD sont nettement inférieures à celles obtenues en DM, ce qui était également le cas des boucles de type <100>. L'examen de cette différence et des réactions topologiques permet d'incriminer les lois de mobilité des segments de type <100>, glissants dans des plans {010} et qui se forment lors de ces interactions. Les paramètres des lois de mobilité ayant été identifiés, au chapitre précédent, sur la base de simulations effectuées à $\boldsymbol{\dot{\varepsilon} = 1.10^7 s^{-1}}$, l'accord DD-DM à cette même vitesse est compréhensible, tout comme le désaccord observé aux plus faibles vitesses. Ce point illustre l'intérêt d'étudier par DM et de développer des lois de mobilité sur d'assez grandes plages de vitesse de déformation et de températures, y compris pour des systèmes de glissement a priori peu connus mais qui comme nous venons de le voir peuvent intervenir très localement lors de réactions.

4.2.3 Bilan des effets de taille et de vitesse de déformation.

Nous avons étudié et mesuré dans cette partie l'effet de la taille des boucles et de la vitesse de déformation imposée sur les interactions entre une dislocation coin et des boucles <100> et ½ $[1\bar{1}1]$. Au final, nous pouvons conclure qu'il existe des effets importants liés à la taille des boucles et à la vitesse de déformation pour tous les types de boucles étudiés dans nos simulations. Dans certains cas, ces effets peuvent modifier le type de réaction observée entre la dislocation et la boucle et ainsi modifier la contrainte critique pour libérer la dislocation de la boucle. On retiendra que dans nos simulations les évolutions observées viennent essentiellement de la compétition entre l'avancée de la dislocation et le mouvement des segments de type <100>{100} pendant la durée de la réaction.

Ces résultats sont importants dans la mesure où les résultats de DM ont des limites fortes en termes de taille de boucles et de vitesse de déformation et donc ne peuvent être comparés directement à l'expérience. Il convient donc de ne pas conclure trop rapidement sur l'effet durcissant ou non de telle ou telle boucle sur la seule base des résultats de DM. Il convient également, avant de transférer les résultats issus des simulations de DD dans des modélisations macroscopiques de plasticité cristalline, de vérifier le domaine de validité des résultats de DD par des résultats expérimentaux.

Finalement, il est évident qu'un point faible des simulations de DD réalisées vient de la simplicité des lois de mobilités que nous avons utilisées pour les systèmes de glissement les moins bien connus. L'utilisation de lois plus sophistiquées et rendant compte par exemple du caractère thermiquement activé du mouvement de certains segments aurait été un plus. Mais, dans l'attente de nouveaux résultats de DM pouvant nous guider pour l'élaboration de ces lois de mobilité, il nous a semblé raisonnable de réaliser nos investigations avec un modèle le plus simple possible. On notera que même avec ce modèle simple, il est étonnant de voir avec quel réalisme nos simulations de DD reproduisent un ensemble très large de résultats de DM réalisés avec différents types de boucles, différentes tailles de boucles et différentes vitesse de déformation.

4.3 Interactions élémentaires entre dislocations vis et boucles d'irradiation

Après avoir étudié les interactions élémentaires entre une dislocation *coin* et différents types de boucle d'irradiation, nous nous intéressons aux interactions impliquant une dislocation *vis*. Nous nous plaçons ici spécifiquement dans le *régime athermique*, valable à partir de la température ambiante, dans lequel les dislocations coin et vis ont des mobilités similaires. Cette étude vise à la fois à identifier les différences qui existent entre dislocations coin et vis (indépendamment des aspects de mobilité), ainsi qu'à valider notre modèle à partir de nouvelles configurations simulées en DM de plus en plus éloignées des conditions initiales d'ajustement.

4.3.1 Interactions avec des boucles ½< 111 >

Nous nous intéressons tout d'abord à l'interaction d'une dislocation vis ½ [111] $(1\bar{1}0)$ et d'une boucle de vecteur de Burgers ½$[1\bar{1}1]$, étudiée en DM aux températures de 100K et 300K [Liu *et al.* 2008] en utilisant un potentiel interatomique P03 [Mendelev *et al.* 2003]. Les calculs de Liu *et al.* [2008] montrent en particulier l'influence de la taille des boucles sur le type de réaction observé. Ainsi, une réaction R_4 (formation d'un tour d'hélice voir Page 33) est observée pour les boucles de petite taille (37 SIAs), tandis qu'une réaction de type R_2 est observée pour les plus grandes boucles (127 à 217 SIAs).

Poursuivant la démarche mise en œuvre jusqu'à présent, nos simulations par DD sont réalisées dans des conditions similaires à ces résultats de DM. La Figure 4.19 ci-dessous illustre la boite de simulation utilisée en DM et en DD :

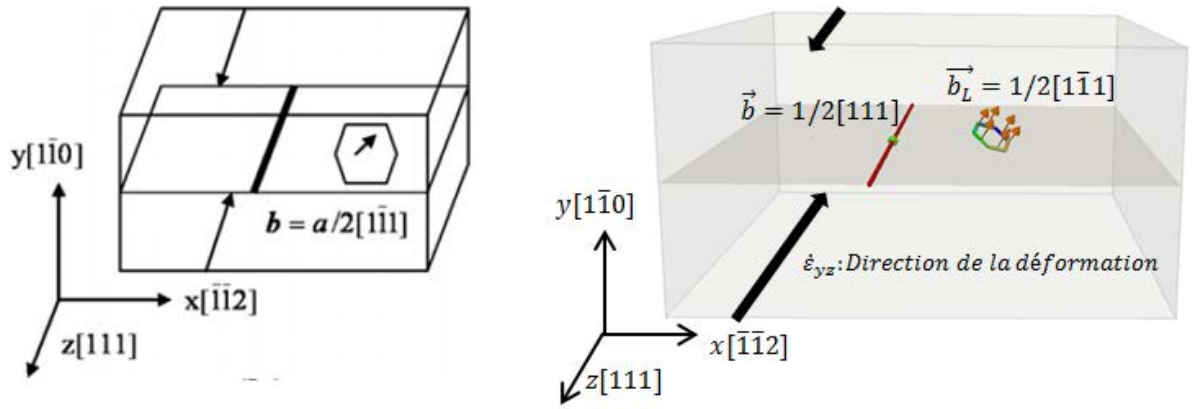


Figure 4.19 Boites de simulations utilisées en DM (figure gauche) et en DD (figure droite)

Les dimensions utilisées sont ainsi identiques à celles des simulations de DM, i.e. L_X = 30 nm, L_Y = 16 nm and L_Z = 30nm. Les conditions aux limites périodiques sont également appliquées en DD dans la direction *z* [111]. Les segments de la boucle ont une taille de 0,8 nm (37 SIAs) ou de 1,5 nm (127 SIAs). La vitesse de déformation retenue $\dot{\varepsilon}_{yz} = 8.10^6 s^{-1}$ est également identique à celle de [Liu *et al.* 2008].

4.3.1.1 Cas de la petite boucle de 37SIAs

Une réaction R_4 avec un tour d'hélice a été observée par DM [Liu *et al.* 2008] pour une boucle de petite taille de 37 SIAs (Figure 4.20).

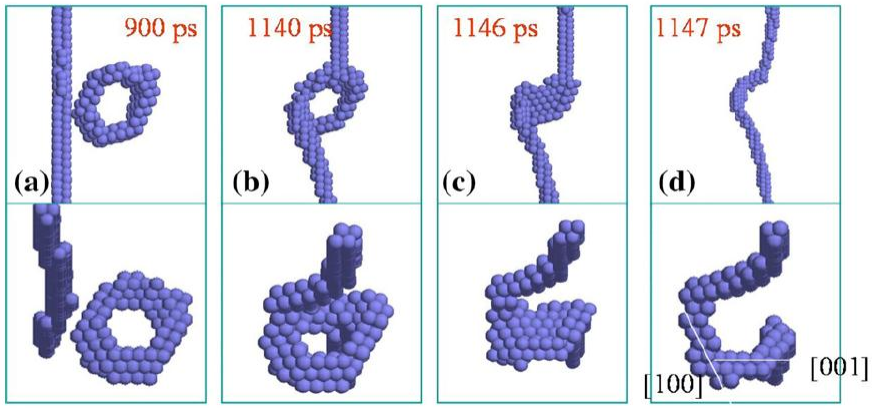


Figure 4.20 Visualisation de l'absorption d'une boucle de 37-SIA de vecteur de Burgers **b**=½[1$\bar{1}$1] avec une dislocation vis dans le fer (R_4) à T = 100K et 300K. [Liu *et al.* 2008]

Un mécanisme similaire est observé par DD pour cette même taille de boucle, selon un mécanisme détaillé dans ce qui suit. L'interaction débute par le rapprochement de la dislocation et de la boucle, cette dernière pouvant glisser (et pivoter) librement sur le cylindre d'axe donné par son vecteur de Burgers b_L, comme indiqué sur la Figure 4.21-b ci-dessous:

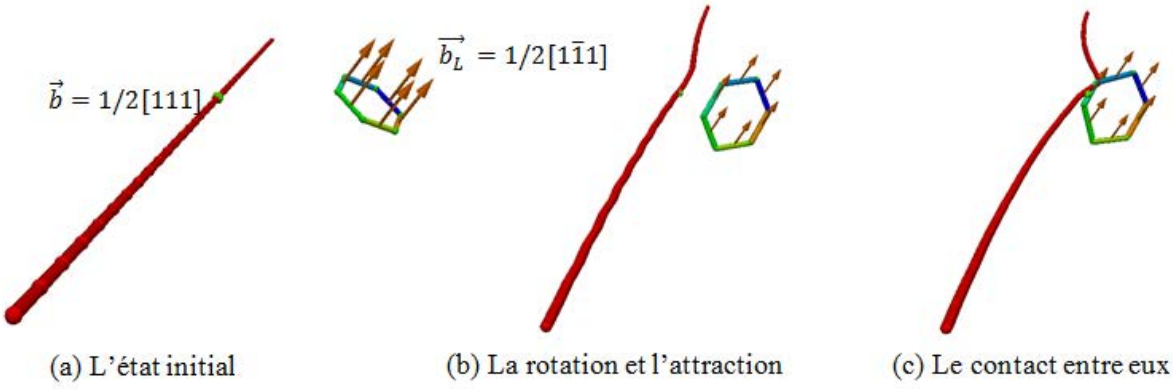


Figure 4.21 Attraction mutuelle de la boucle et de la dislocation vis

Un nouveau segment ① de vecteur de Burgers [010] est alors formé suivant la relation ci-dessous :

$$\frac{1}{2}[111] - \frac{1}{2}[1\bar{1}1] = [010] \tag{32}$$

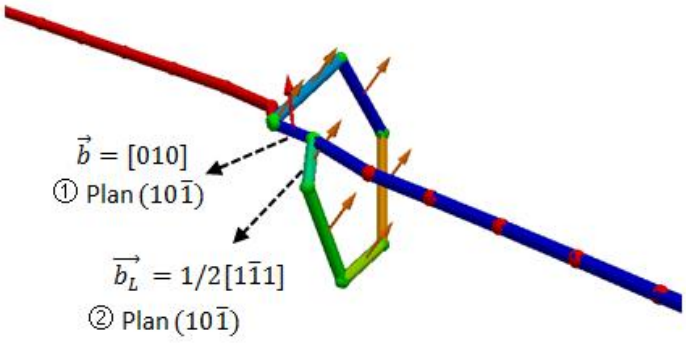


Figure 4.22 Formation d'un segment de vecteur de Burgers [010]

Le segment ① réagit alors avec le segment ② de la boucle pour former un nouveau segment ③ de vecteur de Burgers ½[111] situé dans le plan $(10\bar{1})$ (Figure 2.14):

$$[010] + \frac{1}{2}[1\bar{1}1] = \frac{1}{2}[111] \tag{33}$$

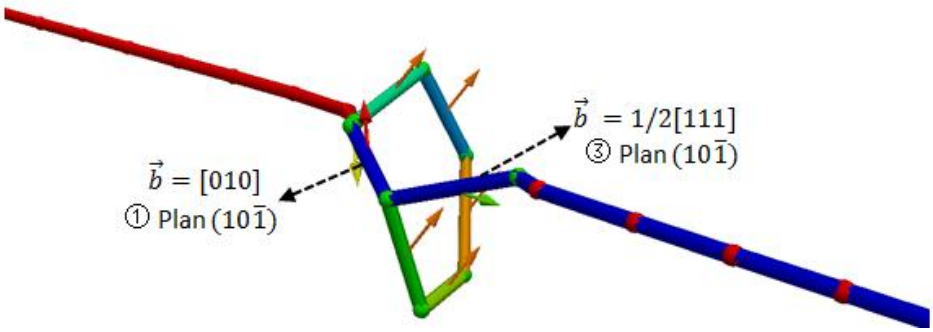


Figure 4.23 La formation du segment ③ avec le vecteur de Burgers $1/2[111]$ dans le plan $(10\bar{1})$

Le segment ①, défini comme glissile au chapitre 2, poursuit son extension et balaye progressivement le plan d'habitat de la boucle jusqu'à absorption totale de la boucle et formation d'un tour d'hélice de vecteur de Burgers ½[111] (Figure 4.24):

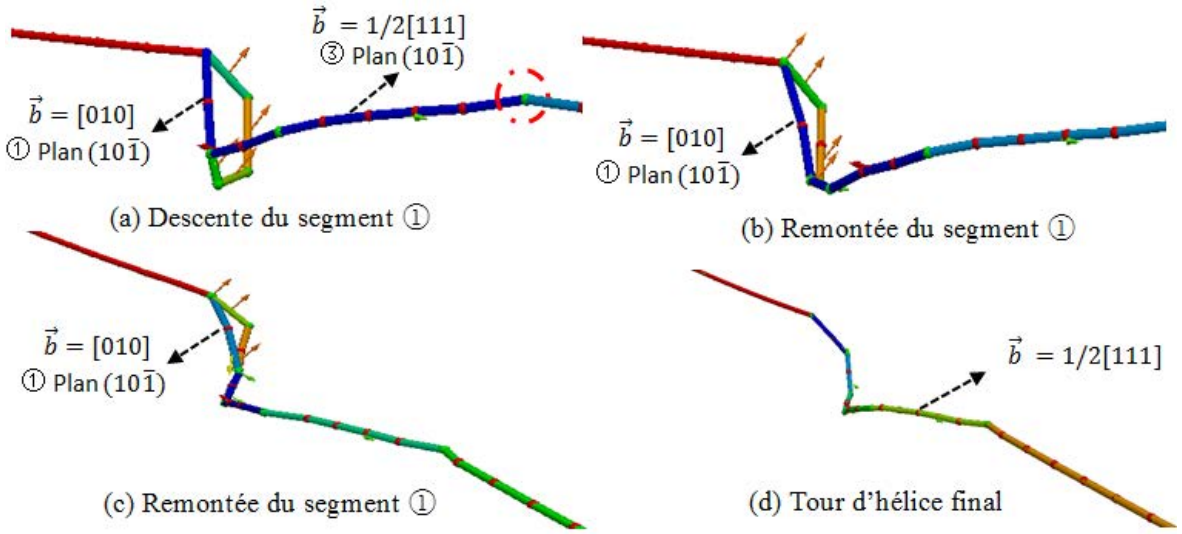


Figure 4.24 Absorption de la boucle par la dislocation vis et formation d'un tour d'hélice de vecteur de Burgers ½[111]

Comme indiqué par Nogaret dans sa thèse [Nogaret 2007], la présence de ce tour d'hélice sur la dislocation, dont les différents plans de glissement sont indiqués à la Figure 4.25, limite considérablement la capacité de mouvement de cette dernière. Les nœuds physiques, situés à l'intersection des différents plans de glissement, sont en effet contraints de rester sur le cylindre de glissement initial de la boucle et empêche la dislocation de se mouvoir librement dans son plan de glissement. L'absorption des boucles de dislocation sous la forme d'une hélice va donc avoir pour effet de bloquer les dislocations mobiles dans la direction vis.

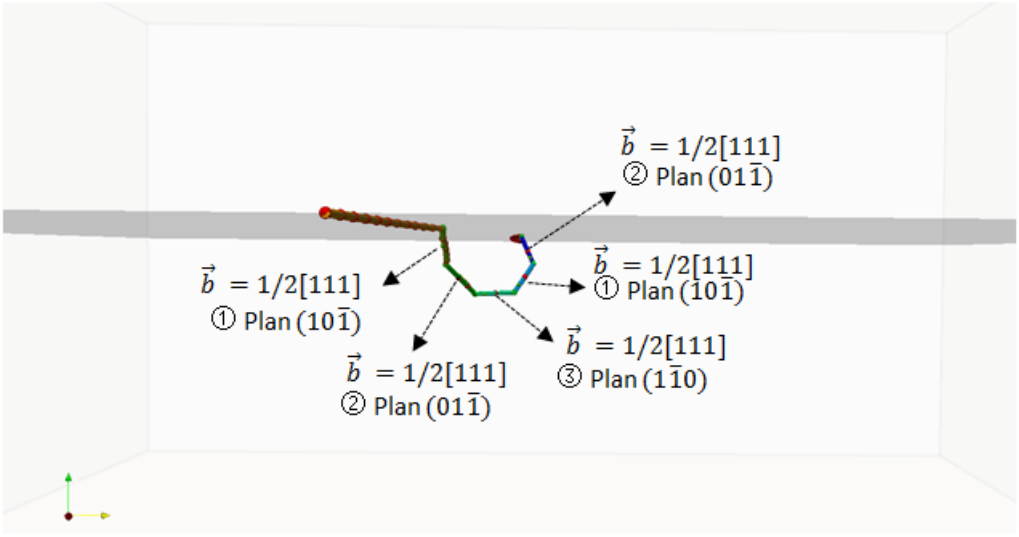


Figure 4.25 Détail des plans de glissement des différents segments du tour d'hélice.

4.3.1.2 Cas de la grande boucle de 127SIAs

Pour une boucle de plus grande taille contenant 127SIAs, [Liu *et al.* 2008] ont observé une réaction de type R_2 (Page 30) comme indiqué dans la Figure 4.26 :

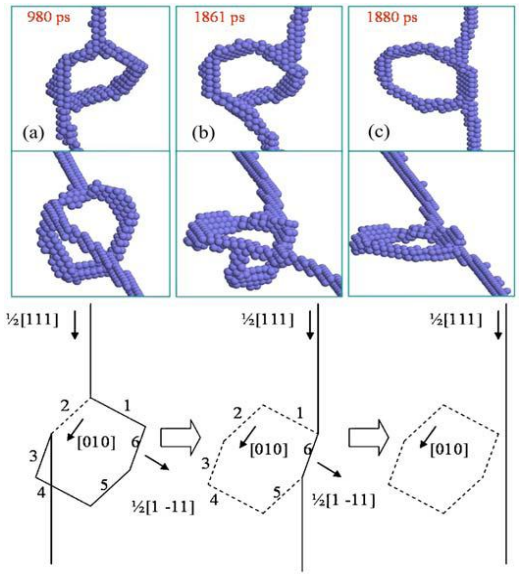


Figure 4.26 Visualisation des glissements et des transformations d'une boucle de 127-SIA avec une dislocation vis dans le fer à T = 100K et 300K. [Liu *et al.* 2008]

Nos simulations de DD n'ont pas permis de reproduire ici l'intégralité de ce mécanisme, même si les premières étapes sont similaires comme indiqué à la Figure 4.27.

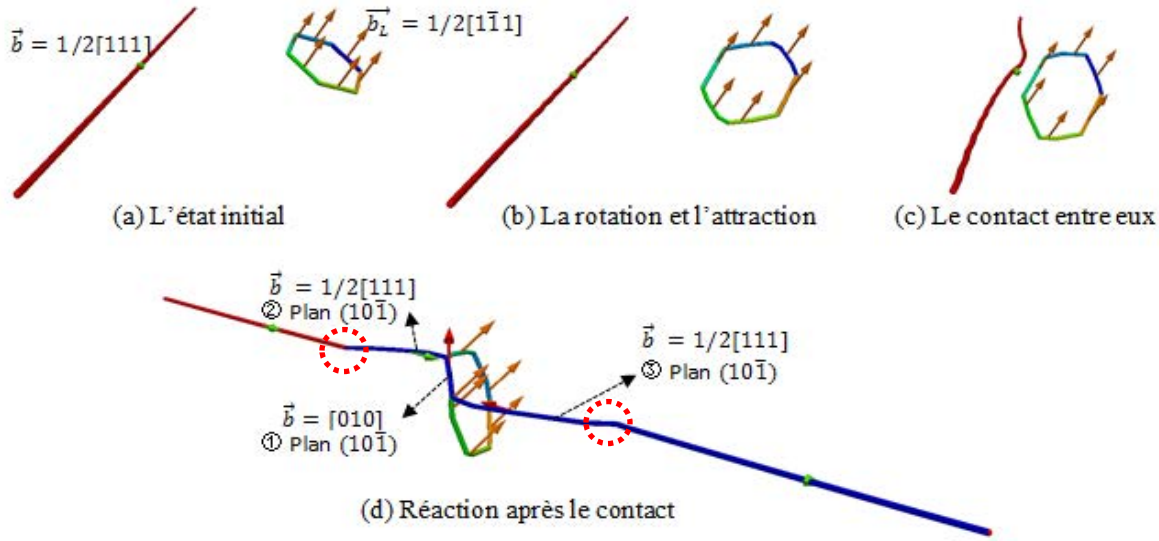


Figure 4.27 L'attraction mutuelle de la boucle et de la dislocation suivie de leur premier contact entre une dislocation vis et une grande boucle de vecteur de Burgers ½[1$\bar{1}$1] en DD

Les différences entre DM et DD en termes topologiques sont détaillés sur la Figure 4.27 (d). Au lieu de voire le segment ① se propager autour de la boucle comme en DM, nous observons l'extension des segments ② et ③, situés, non pas dans le plan de $(1\bar{1}0)$ initial mais dans le plan $(10\bar{1})$. Cette extension est induite par le mouvement des nœuds physiques (entourés par des pointillés rouges) situés à l'intersection de ces deux plans, qui finissent par le jeu des conditions aux limites périodiques par se rencontrer et à amener l'ensemble de la dislocation initiale à changer de plan de glissement, contrairement à ce qui est observé en DM. Il semble donc que la loi de mobilité appliquée aux nœuds physiques à l'intersection des plans $(1\bar{1}0)$ et $(10\bar{1})$ dans notre modèle n'est pas conforme à la mobilité observée en DM. On voit donc apparaître ici une limite de notre modèle qui devrait inclure des lois de mobilité plus complexe que celle définies à l'étape d'ajustement du chapitre 3 pour ce calcul. En effet, les simulations utilisées lors de notre ajustement n'étaient pas sensible à la mobilité de ces nœuds particuliers dans la direction vis.

4.3.2 Interactions avec des boucles <100>

Nous nous intéressons dans cette section aux interactions d'une dislocation vis avec des boucles de type <100> que nous comparerons, là-encore, aux résultats obtenus en DM par Terentyev *et al.* [2009] avec un potentiel interatomique P04 [Ackland *et al.* 2004]. Les dimensions de la boite de simulation sont $L_X = 25$ nm, $L_Y = 28$ nm and $L_Z = 25$ nm (Figure 4.28). Des conditions aux limites périodiques sont appliquées dans la direction *x* [111] et la direction *y* $[\bar{1}\bar{1}2]$. Les boucles sont de forme carrée avec des côtés suivant les directions <100> de 2,3 nm (128 SIAs) conformément à la taille des boucles simulées en DM. La vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}_{xz} = 1.10^7 s^{-1}$ est également identique à celle appliquée en DM [Terentyev *et al.* 2009]. Notons que nous ne nous confronterons ici qu'aux résultats de cette étude de DM pour la température de 300 K qui constitue la limite basse du régime athermique.

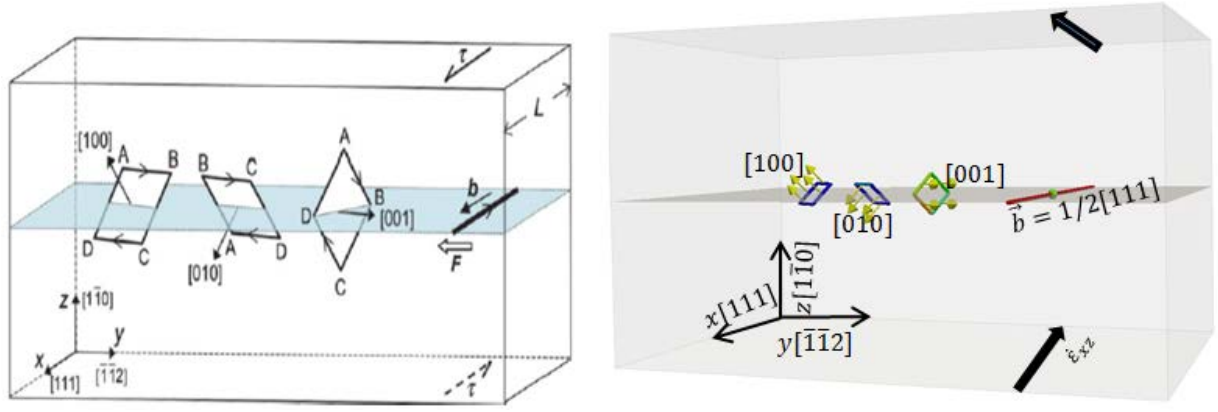


Figure 4.28 Les boites de simulations utilisées en DM (figure gauche) et en DD (figure droite) pour la simulation des interactions entre dislocations vis et boucles [100].

4.3.2.1 *Cas d'une boucle de vecteur de Burgers [001]*

Une réaction de type R_1 (Page 29) a été observée par DM [Terentyev *et al.* 2009] comme indiqué dans la Figure 4.29 :

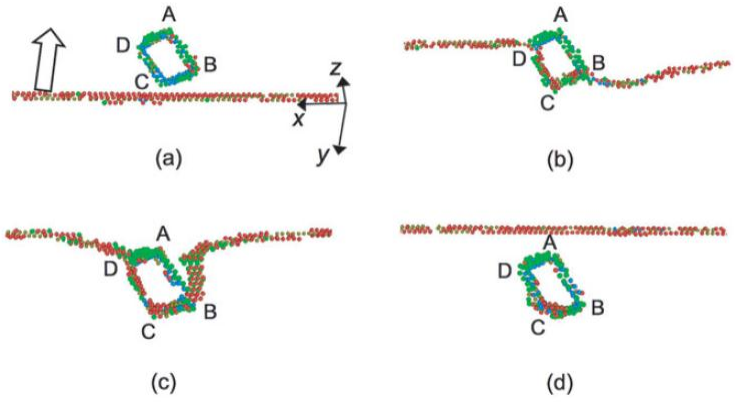


Figure 4.29 Visualisation des interactions entre une dislocation vis et une boucle de 128-SIA dans le fer à T =300K et $\dot{\varepsilon}=10^7$ s^{-1}. [Terentyev *et al.* 2009]

La dislocation vis réagit tout d'abord avec la partie basse de la boucle en formant des nouveaux segments de vecteur de Burgers ½[$\bar{1}\bar{1}$1] suivant la réaction :

$$[001]-\frac{1}{2}[111]=\frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}1] \tag{34}$$

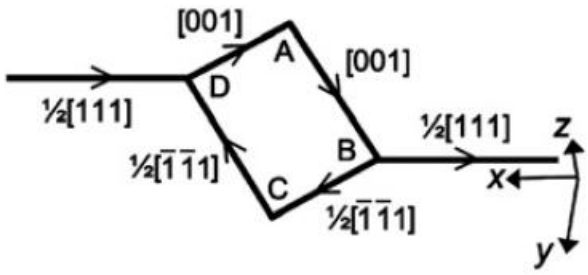


Figure 4.30 Présentation schématique de la réaction initiale entre la dislocation vis et la boucle de vecteur de Burgers [001] [Terentyev *et al.* 2009]

Avec l'augmentation de la contrainte appliquée, la dislocation continue à se courber puis pousse le segment au point B (comme noté sur la Figure 4.30), à changer localement de plan de glissement et à descendre vers le point C. Le segment BC redevient alors un segment de vecteur de Burgers [001]. La partie restante de la dislocation se combine alors avec le segment CD avant de se libérer de la boucle en laissant une boucle de vecteur de Burgers [001] identique à la boucle initiale (Figure 4.29-d).

Comme le montre la Figure 4.31, nos simulations de DD ne permettent malheureusement pas de reproduire le mécanisme observé en DM. Nous observons ici un cisaillement simple de la boucle initial comme indiqué à la Figure 4.31. Un examen détaillé montre que la raison de ce désaccord est similaire au

cas S_{00} observé précédemment dans le cas des dislocations coin (voir la section 4.1). L'amélioration de l'algorithme de formation de jonctions pourrait permettre, dans le futur, de mieux reproduire le mécanisme observé par DM.

Notons tout de même que si le mécanisme d'interaction n'est pas reproduit ici, la reformation de la boucle [001] initiale et le niveau de contrainte obtenu (250 MPa en DD v.s. 258 MPa en DM) sont similaires à ceux obtenus en DM. Le franchissement de ce type de boucle ne semble donc pas sensible aux détails de la réaction intervenant entre boucle et dislocation.

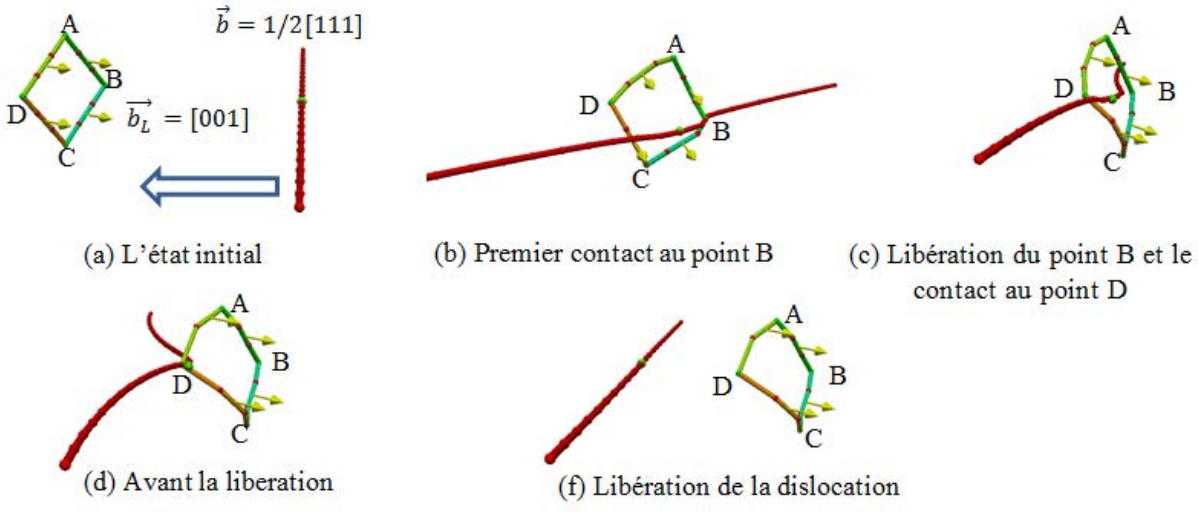


Figure 4.31 Principales étapes d'interactions en DD entre la dislocation vis et la boucle de vecteur de Burgers [001] dans le fer, à $\dot{\varepsilon}=10^7$ s^{-1}

4.3.2.2 *Cas d'une boucle de vecteur de Burgers [010]*

Une réaction de type R_4 avec formation d'un tour d'hélice a été observée en DM [Terentyev *et al.* 2009] avec les boucles de vecteur de Burgers [010] (voir Figure 4.32 ci-dessous) :

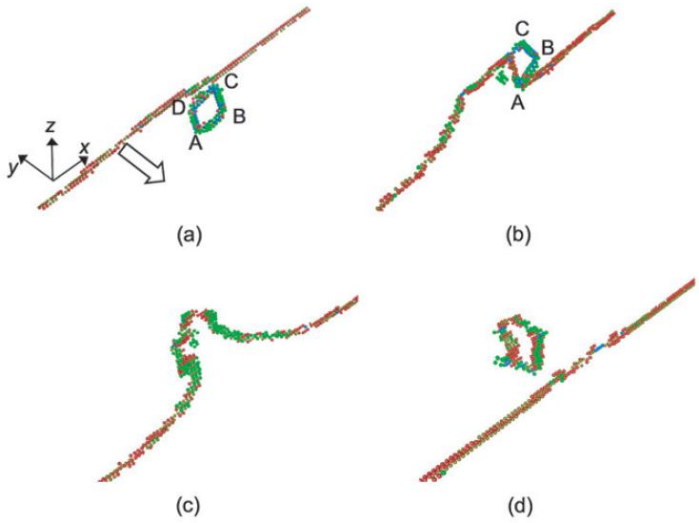


Figure 4.32 Visualisation des interactions entre une dislocation vis ½[111]$(1\bar{1}0)$ et une boucle [010] dans le fer à T =300K. [Terentyev *et al.* 2009]

Après une répulsion initiale qui doit être compensée par une augmentation de la contrainte appliquée, la dislocation entre en contact avec la boucle au point D. La dislocation transforme ensuite le segment AD de vecteur de Burgers [010] en ½[$\bar{1}1\bar{1}$] suivant l'équation (35) (cf. Figure 4.33) :

$$[010] - \frac{1}{2}[111] = \frac{1}{2}[\bar{1}1\bar{1}] \tag{35}$$

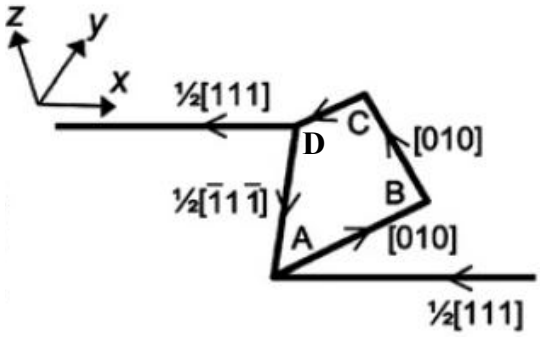


Figure 4.33 Présentation schématique de la réaction initiale entre la dislocation vis et la boucle de vecteur de Burgers [010] [Terentyev *et al.* 2009]

Ce nouveau segment étant mobile, le point D se dirige alors vers le point C, et le point A vers le point B, absorbant finalement le segment [CB] et formant un tour d'hélice de vecteur de Burgers ½[111] (voir la Figure 4.32-c). Sous l'influence de la contrainte appliquée, la dislocation incidente va alors se refermer en formant ici une boucle de vecteur de Burgers ½[111] différent de la boucle initiale (voir la Figure 4.32-d).

En DD, l'interaction initiale entre la dislocation et la boucle est une répulsion (Figure 4.34-b). La dislocation avance vers la boucle quand la contrainte appliquée augmente, puis une jonction au milieu du segment AD se forme lors du contact (Figure 4.34-c) comme en Dynamique Moléculaire. Un nouveau

segment ① de vecteur de Burgers ½[$\bar{1}1\bar{1}$] et de plan ($\bar{1}12$) est formé. Ce système de glissement étant très mobile, ces segments montent très rapidement sous l'action de la contrainte interne (Figure 4.34-d). Lorsque la contrainte appliquée est suffisamment forte, ces segments redescendent vers le plan de glissement de la dislocation vis et réagissent avec les deux côtés de la dislocation courbée (Figure 4.34-e). Finalement, les deux côtés de la dislocation se rencontrent au point D pour reformer la boucle initiale de vecteur de Burgers [010] (Voir Figure 4.34-f).

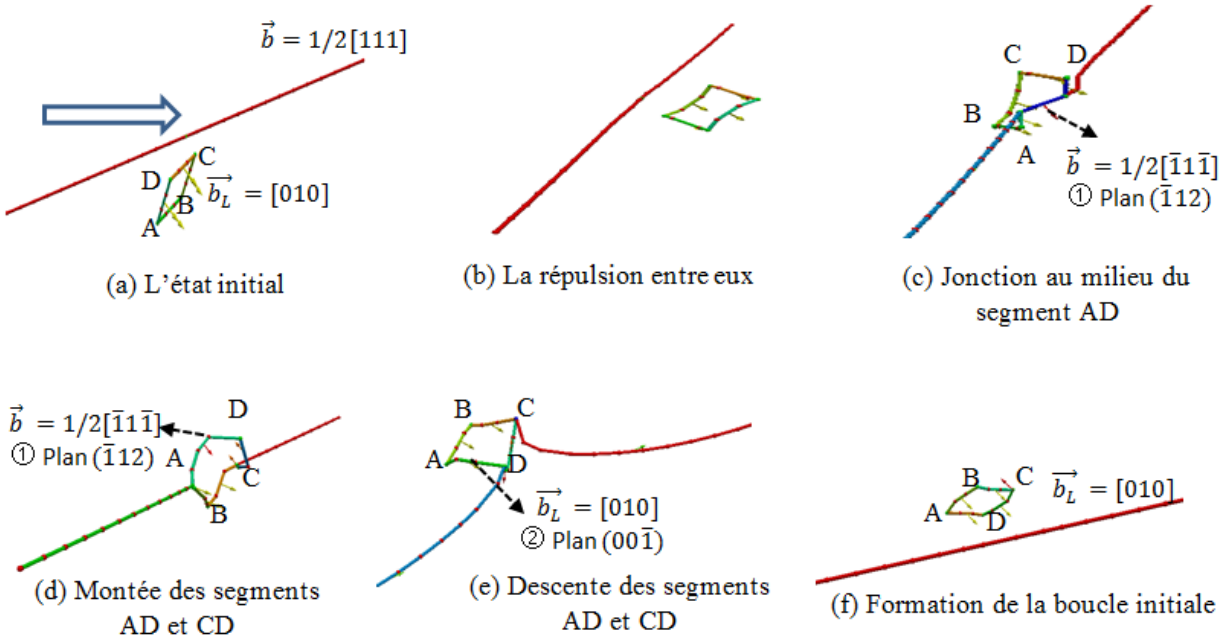


Figure 4.34 Etapes principales des interactions entre la dislocation vis et la boucle de vecteur de Burgers [010]

La réaction obtenue en DD s'apparente à la réaction R_1 obtenue pour la boucle de vecteur de Burgers [001] mais pas à la réaction R_4 observée en DM. Là-encore, il est possible d'incriminer un mécanisme d'interaction de type S_{00} qui ne figure actuellement pas dans le code *NUMODIS*. Notons que la contrainte critique obtenue est de 500 MPa en DD, est une valeur qui est bien plus forte que celle calculée précédemment pour la boucle [001] et qui est comparable à la valeur de 420 MPa estimée par DM.

4.3.2.3 *Cas de la boucle de vecteur de Burgers [100]*

Pour cette boucle de vecteur de Burgers [100], une réaction de type R_4 avec un tour d'hélice a été observée en DM [Terentyev *et al.* 2009] (Figure 4.32). Cette réaction R_4 est ici bien reproduite par DD comme l'illustre la Figure 4.35 ci-dessous. La dislocation incidente est tout d'abord attirée par la boucle (Figure 4.35-b), puis réagit avec elle au milieu du segment (Figure 4.35-c) suivant la réaction :

$$[100] - \frac{1}{2}[111] = \frac{1}{2}[1\bar{1}\bar{1}] \tag{36}$$

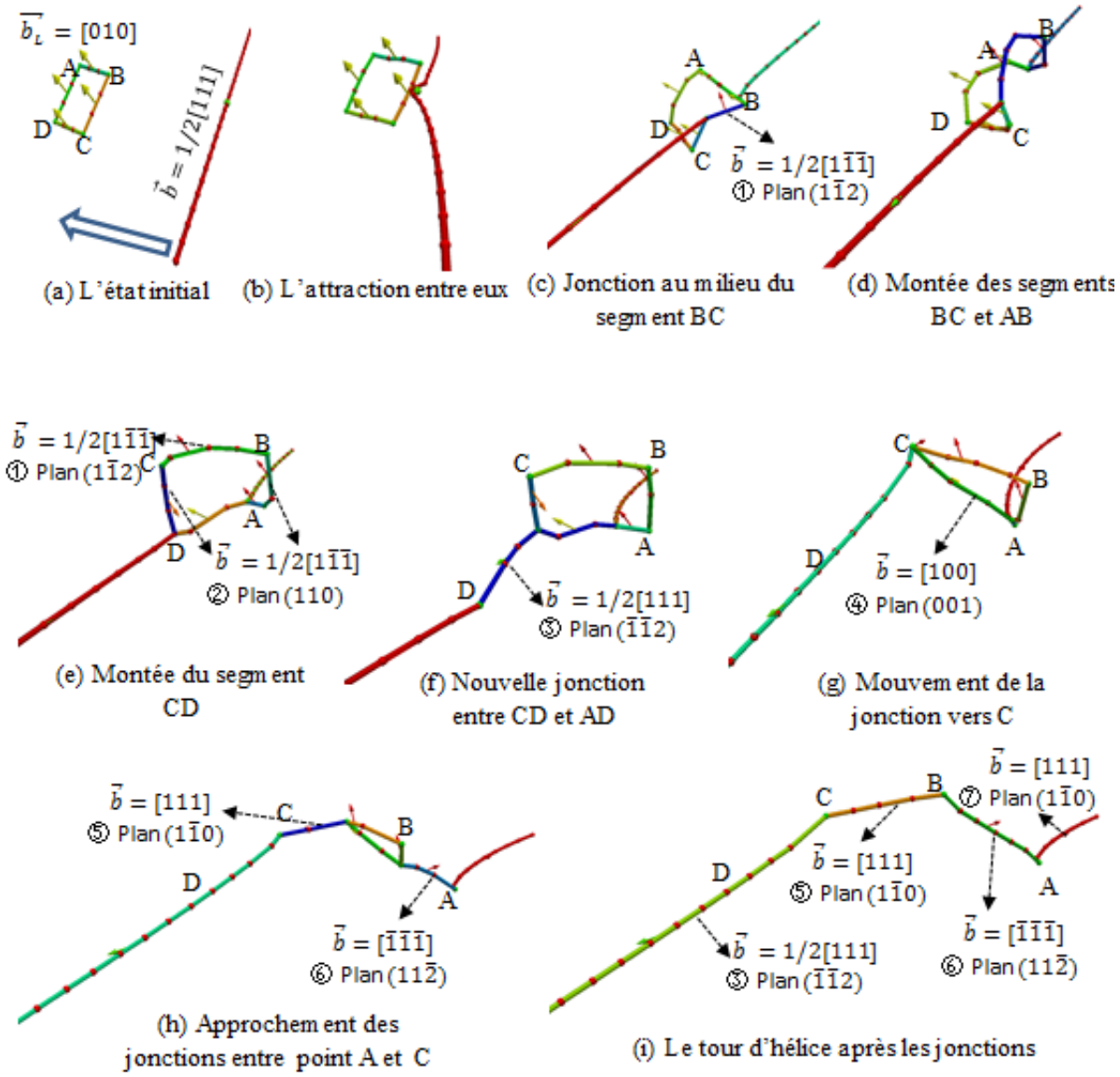


Figure 4.35 Principales étapes d'interactions obtenues en DD entre la dislocation vis et la boucle de vecteur de Burgers [100] dans le fer

La dislocation continue sa réaction avec les segments AB et CD quand ils se déplacent vers le haut (Figure 4.35-d et e). Une nouvelle jonction se forme au point D (Figure 4.35-f) en créant un segment ③ de vecteur de Burgers ½[111] et de plan $(\bar{1}\bar{1}2)$. Avec l'augmentation de la contrainte appliquée, cette jonction continue vers le point C (Figure 4.35-g), puis vers le point A (Figure 4.35-h) en transformant les segments de la boucle en tour d'hélice de vecteur de Burgers ½[111] (Figure 4.35-i). A la fin de la simulation, le tour d'hélice s'étale sur son cylindre de glissement afin de minimiser son énergie (et donc la longueur du tour d'hélice).

Notons que des restrictions topologiques liés à une implémentation incomplète des conditions aux limites périodiques ne nous ont pas permis d'observer comme en DM, la fermeture de la dislocation et la formation d'une boucle de vecteur de Burgers ½[111].

4.3.3 Bilan des simulations d'interaction entre une dislocation vis et des boucles d'irradiation ½ <111> et <100>

Nous avons étudié par DD les interactions entre une dislocation vis et des boucles induites par l'irradiation de type ½<111> et <100>. Nous avons comparé ces résultats à des calculs réalisés par DM pour des configurations similaires. Nous avons observé un accord satisfaisant entre ces deux techniques, notamment en termes de contraintes critiques de franchissement.

Si une grande partie des réactions observées en DM sont bien reproduites, nous avons toutefois constaté plusieurs différences, qui nous incitent à poursuivre le travail d'analyse de ces simulations et le développement de certains éléments manquants dans notre modèle de DD. La mise au point de l'algorithme de scission d'un nœud multiple en trois nouveaux nœuds, accompagné simultanément de la formation de deux voire trois jonctions entre ces nœuds, est de ce point de vue important et permettrait, théoriquement de se rapprocher de la DM dans plusieurs des situations pathologiques reportées ici.

4.4 Simulations massives

La confrontation des résultats d'interactions élémentaires entre dislocations et boucles, par DM et DD, nous a permis de valider notre outil de simulation. Bénéficiant ainsi de la réduction drastique du nombre de degrés de liberté offerte par la DD pour ces réactions élémentaires, il devient possible de simuler le comportement d'un volume dont la taille, le nombre et la distribution de défauts induits par l'irradiation se rapprochent davantage des préoccupations industrielles. L'enjeu est ici clairement de poursuivre notre approche multi-échelles en fournissant, par des simulations « massives », des informations voire des paramètres pertinents pour formuler des équations de plasticité cristalline.

S'agissant d'une étape entreprise au terme de ces trois années de thèse, et qui s'appuie en outre sur une version uniquement séquentielle du code NUMODIS, l'objectif de ce travail reste modeste et il conviendra de le généraliser à l'avenir par des calculs parallèles et de dimensions plus importantes. Cette entrée en matière est toutefois intéressante et fournit, comme nous le verrons ci-dessous, des premières informations originales sur le durcissement du fer induit par une microstructure de boucles d'irradiation.

Nous avons choisi ici d'étudier le mouvement et la contrainte nécessaire pour faire bouger une longue dislocation dans un volume contenant une densité réaliste de boucles d'irradiation <100>. Notre choix s'est porté en priorité sur ce type de défauts d'irradiation, car ce sont les défauts principalement observés à la température de fonctionnement des réacteurs, i.e. 300°C. La densité et la taille des boucles considérées sont représentatives du fer irradié. Une illustration de la boite de simulation utilisée dans cette partie est présentée en Figure 4.36.

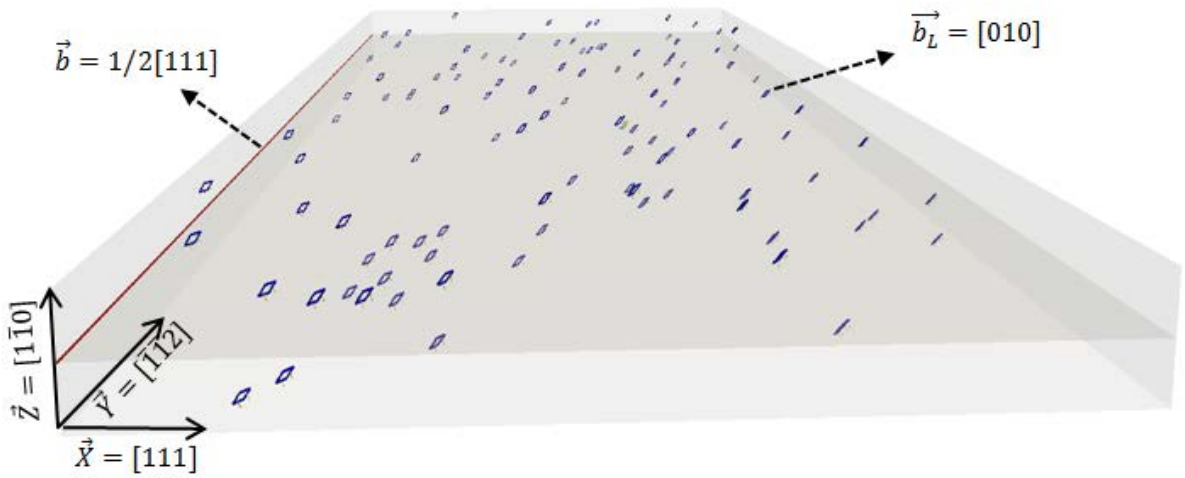


Figure 4.36 Simulation entre une dislocation coin et une densité de boucle de type S_{-0}

La boite de simulation a pour dimensions 0,2 µm, 0,5 µm et 0,02 µm[3], respectivement suivant les axes X[111], Y[$\bar{1}\bar{1}2$] et Z[$1\bar{1}0$]. Des conditions aux limites périodiques sont appliquées suivant les axes X et Y. Une dislocation coin est introduite sur un côté de la boite et avance au cours de la simulation avec une vitesse de cisaillement de $1{,}25.10^6$ s^{-1} selon XZ (cette vitesse de déformation correspond à une vitesse imposée de 40 m/s sur la dislocation mobile. C'est donc la même vitesse appliquée que lors de nos simulations élémentaires au chapitre précédent). La densité de boucles <100> implantées aléatoirement dans tout le volume de la boite de simulation est de N=5.6 10^{22} m^{-3}. La longueur choisie du côté des boucles est de d=2,6 nm, en bon accord avec les valeurs observées expérimentalement dans du fer pur irradié [Zinkle *et al.* 2006]. Un calcul rapide montre que le choix de ces deux quantités impose un espacement moyen entre boucles dans le plan de glissement de la dislocation de $l = (\mathrm{Nd})^{-1/2} = 83$ nm. L'espacement moyen entre boucles dans les simulations massive est donc statistiquement deux fois plus grand que celui des simulations élémentaires considérant un réseau périodique de boucles. Notons que les paramètres matériau, tout comme les longueurs de discrétisation, sont identiques à ceux utilisés pour les interactions élémentaires. Seul chaque pas de temps de calcul Δt est modifié, nous avons utilisé un pas de temps 100 fois plus grand que celui des simulations élémentaires afin d'avoir des calculs plus rapide. Nous avons vérifié que l'augmentation du pas de temps n'influencait pas les résultats et garantissait toujours la stabilité du calcul et la reproduction des mécanismes individuels comme illustré sur la Figure 4.38.

Dans une démarche analytique, nous débutons notre étude par le cas où un seul variant de boucle <100> est implanté dans la boite de simulation. Nous passerons ensuite au cas où tous les types de boucle sont présents. Nous étudions tout d'abord le cas S_{-0} (i.e. boucles de vecteur de Burgers [010] avec ses côtés [100] et [001]) qui donne lieu à la plus forte contrainte critique d'après les simulations élémentaires effectuées précédemment.

[3] Un volume contenant approximativement 171 millions d'atomes est donc inenvisageable en DM.

Pendant la simulation, selon la position où se situent les boucles, la dislocation peut se retrouver dans une zone d'attraction ①, une zone de répulsion ② ou une zone de contact ③ (voir la Figure 4.37) avec des boucles.

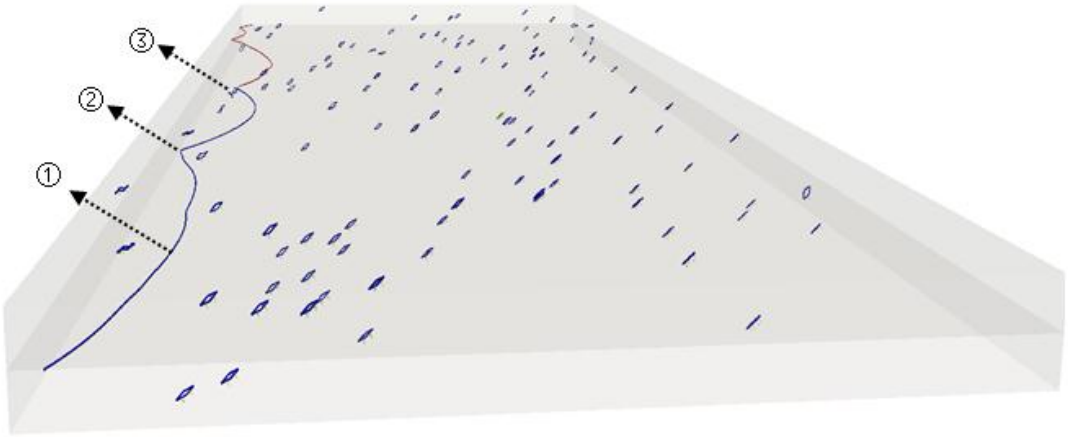


Figure 4.37 Déplacement d'une dislocation en interaction avec des boucles induites par l'irradiation : des interactions de natures différentes sont identifiées (1) attraction élastique, (2) répulsion élastique, et (3) contact direct.

Une analyse montre que la dislocation, initialement rectiligne va tout d'abord se courber en fonction des différentes interactions élastiques à longue distance ① et ② qu'elle subit, en raison notamment de l'hétérogénéité de la répartition des boucles dans le volume. Ce premier phénomène induit une très faible déformation plastique et n'influence pas beaucoup la courbe contrainte déformation calculée. Ensuite on observe rapidement la formation de contacts ③ qui donnent lieu à des réactions similaires à celles identifiées précédemment (voir Figure 4.38 ci-dessous) :

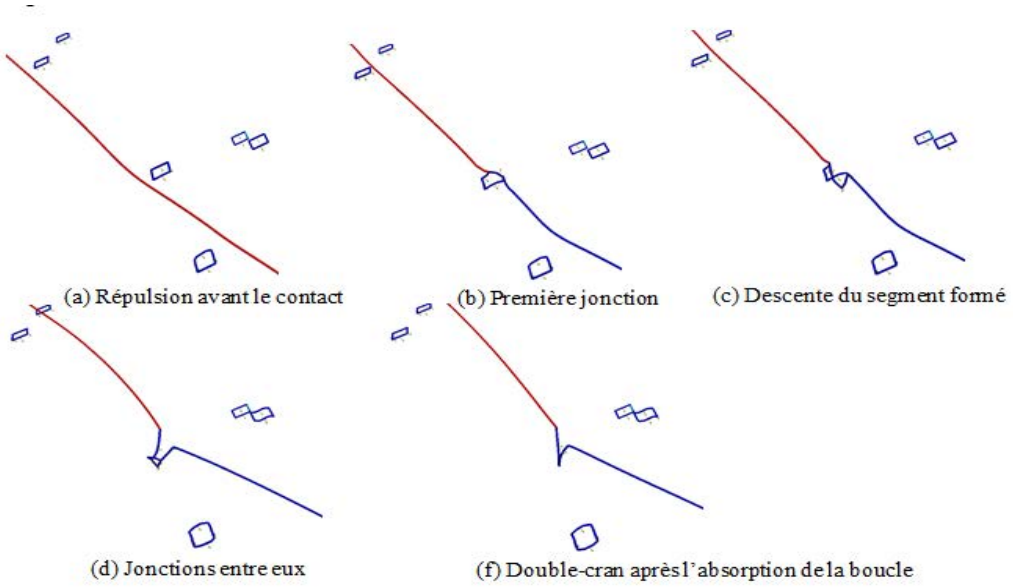


Figure 4.38 Différents étapes d'une réaction R_3 dans la zone de contact pendant une simulation massive avec des boucles S_{-0}.

La réaction présentée sur la Figure 4.38 est une réaction de type R_3. Elle correspond à celle que nous avons présentée dans les simulations élémentaires au chapitre 3 pour la configuration S_{-0}. La réaction correspond à la formation de double-crans le long de la ligne et ces double-crans peuvent se déplacer dans un 'tube' parallèle à la direction de son vecteur de Burgers ½[111] qui est donc très mobile sur une dislocation coin de vecteur de Burgers ½[111] et ancre fortement les dislocation vis de même vecteur de Burgers.

Après propagation de la dislocation sur une grande distance dans son plan de glissement (le balayage complet de la boite de simulation par la dislocation équivaut à une déformation de b/h = 1,2%, ici b est la norme du vecteur de Burgers de longueur 2,473 Å et h est la hauteur de la boite de simulation 20 nm), nous pouvons tracer la courbe contrainte-déformation reportée en Figure 4.39.

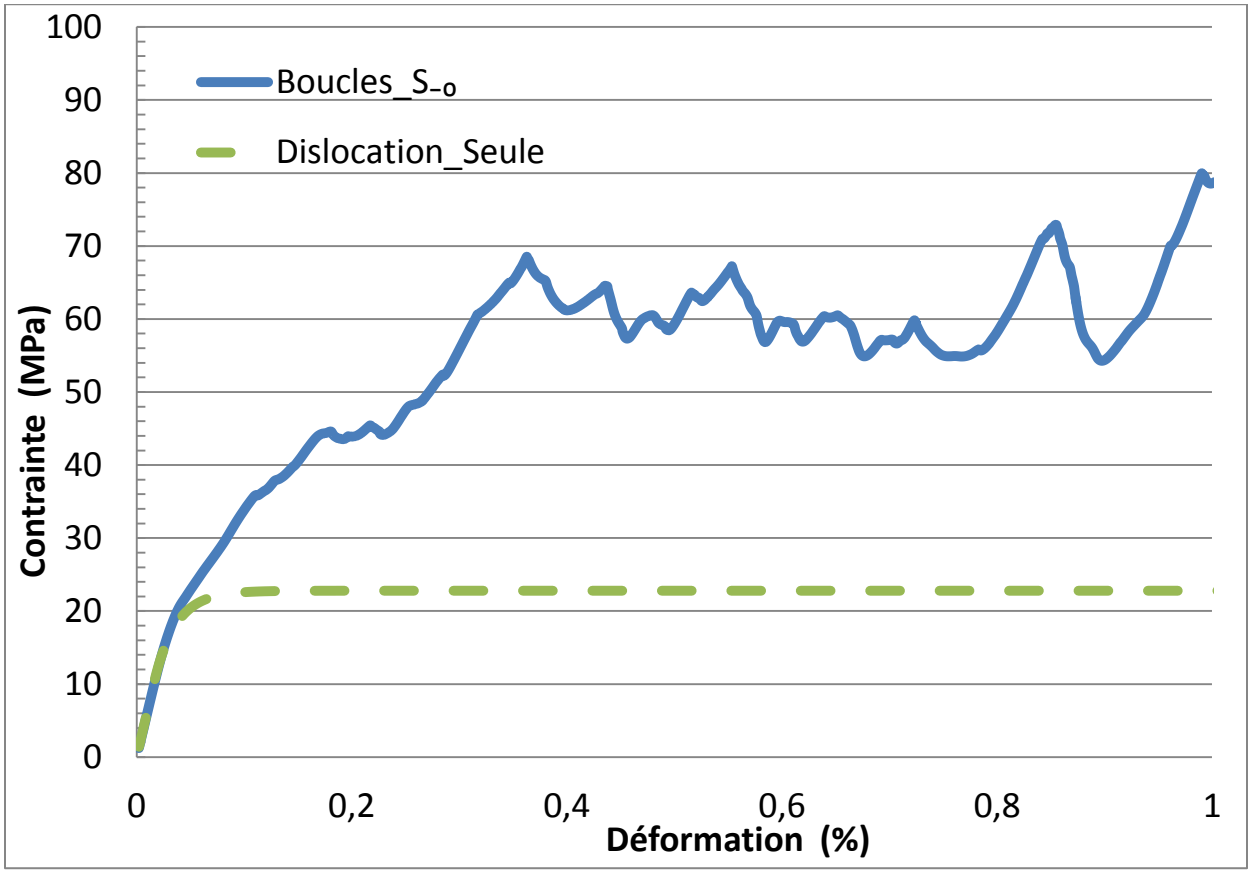


Figure 4.39 Courbe contrainte-déformation avec des boucles en configuration S_{-0} (bleu) ou sans boucle (vert).

Cette courbe d'écoulement illustre le durcissement moyen $\Delta\tau$ induit par les boucles dans le plan de glissement de la dislocation. La vitesse imposée à la dislocation mobile dans les simulations en masse étant identique à celle appliquée lors des simulations élémentaires nous pouvons comparer directement ces simulations entre elles. Comme attendu, nous vérifions que la contrainte d'écoulement calculée lors des simulations en masse est plus faible pour une réaction donnée, puisque la densité linéique de boucles bloquant la dislocation est maintenant plus faible (60 MPa v.s. 150 MPa).

Afin d'évaluer une dureté intrinsèque de chaque type de réaction, il nous faut donc utiliser un modèle indépendant des spécificités géométriques de chaque simulations. Dans la continuité des travaux de [Bacon *et al.* 1973] nous décidons ici d'utiliser un modèle simple proposé par Orowan. Ce modèle repose sur une équation adimensionnelle qui relie le durcissement $\Delta\tau$ associé à la population d'obstacles et à la force de résistance moyenne de ces obstacles :

$$\Delta\tau = \alpha\mu b(Nd)^{1/2} \tag{37}$$

Ici μ est le module de cisaillement du matériau, 65 GPa, b est la norme du vecteur de Burgers de longueur 2,473 Å, N est la densité des boucles, $5{,}6*10^{22}$ m^{-3} et d est le diamètre moyen des boucles dans le plan d'intersection de la dislocation mobile. Dans le cas de boucles carrées, nous avons supposé que ce diamètre est proche de la longueur du côté des boucles, soit d=2,6 nm. Finalement, $\Delta\tau = (\tau - \tau_f)$ avec τ_f=10MPa la friction de réseau appliqué à la dislocation coin mobile dans son plan de glissement. Cette dernière correction de la contrainte est nécessaire pour définir une force d'obstacle α indépendante de la vitesse de déformation imposée.

A la contrainte de plateau de la Figure 4.39, nous pouvons donc estimer que $\alpha = 0{,}26$ pour les boucles de type S_{-0} contre $\alpha = 0{,}75$ pour les simulations élémentaires sur la Figure 4.2, ce qui montre bien l'intérêt d'effectuer des simulations massives et de ne pas se contenter des simulations élémentaires.

Nous avons aussi effectué des simulations similaires pour les deux autres types de boucle <100>. Les courbes d'écoulement obtenues dans le plan de la dislocation sont présentées ci-dessous. Elles sont également comparées à la contrainte d'écoulement d'une dislocation isolée soumise à la même vitesse de déformation.

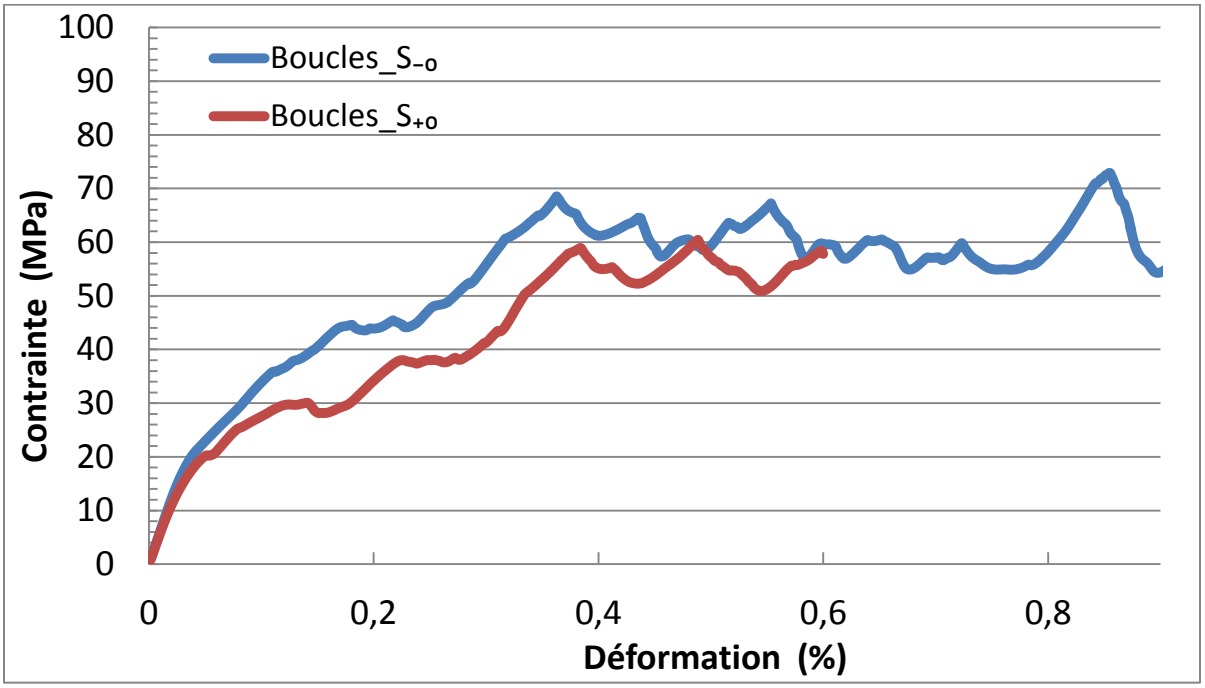


Figure 4.40 Courbe contrainte-déformation pour les différents types de boucles <100>

Des contraintes de temps ne nous ont malheureusement pas permis de reproduire une déformation similaire à celle calculée pour la réaction S_{-0}. Cependant, à la vue des débuts de plateau assez nets reproduits sur la Figure 4.40, nous avons considéré que ces simulations étaient suffisamment avancées pour calculer la force moyenne de ces obstacles. Les différentes valeurs que nous avons obtenues pour les trois types de boucle sont reportées dans le tableau ci-dessous :

Tableau 4.1 Durcissement des différents types de boucle <100> et leur force d'obstacle estimée

Type de boucle	S_{-0}	S_{+0}	S_{+1}
$\Delta\tau$ (MPa)	50	45	20
α	0,258	0,232	0,103

D'après la Figure 4.40 et le Tableau 4.1, nous pouvons constater que les deux types de boucle S_{-0} et S_{+0} donnent lieu à une force d'obstacle du même ordre de grandeur, tandis que celle obtenue pour le cas S_{+1} est beaucoup plus faible. Cette tendance est en accord avec nos premiers résultats avec les simulations d'interactions élémentaires.

Ces résultats montrent que le durcissement calculé pour un système de glissement 's' donné va dépendre de la nature des boucles <100> qu'il rencontre. Cette observation suggère qu'il faudrait en toute rigueur distinguer, dans l'équation donnant le durcissement sur chaque système 's', la densité de boucles de vecteurs de Burgers de type <100> intersectées. Ceci pourrait se traduire au travers d'une matrice d'interaction de taille 12*3 (12 comme les douze systèmes de glissement $\frac{1}{2} < 111 > \{1\bar{1}0\}$ et 3 comme le nombre de variants de Burgers <100>), similaire a la matrice d'interactions déjà utilisée dans la littérature pour modéliser le durcissement de la forêt ([Franciosi 1983], [Devincre *et al.* 2006]). Cependant, ce type de modélisation nous a semblé difficile à mettre en œuvre à court terme avec des simulations de plasticité cristalline car elle serait à l'origine d'une inflation des paramètres de calculs. C'est pourquoi, nous avons entrepris de nouvelles simulations massives afin de calculer la force d'obstacle moyenne d'une microstructure faite de différents types de boucles.

Nous avons donc réalisé trois simulations contenant des distributions de trois variants de boucles <100>. La première simulation est réalisée avec les trois types de boucle S_{00}, S_{+0} et S_{-0} dont les côtés sont orientés dans la direction <100>. La seconde simulation est lancée avec les trois types de boucle S_{01}, S_{+1} et S_{-1} dont les côtés sont dans la direction <110>. Et enfin, la troisième simulation est réalisée avec un mélange de l'ensemble de ces six types de boucles. L'objectif est ici de mesurer une valeur moyenne de force d'obstacle.

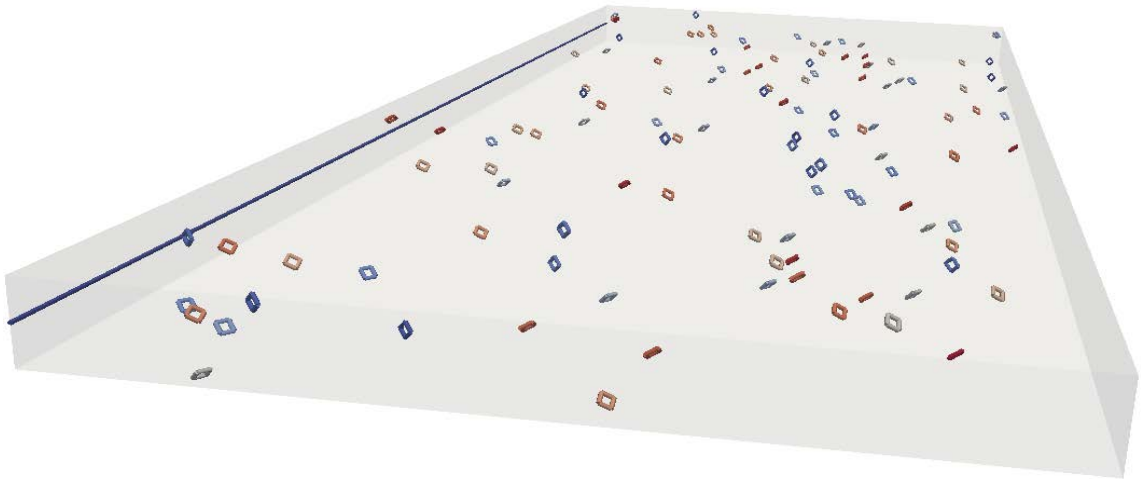


Figure 4.41 Simulation d'une dislocation coin contenant tous les différents types de boucle <100> : S_{00}, S_{01}, S_{+0}, S_{+1}, S_{-0}, S_{-1}. Les différentes couleurs présentent les différents types de boucle

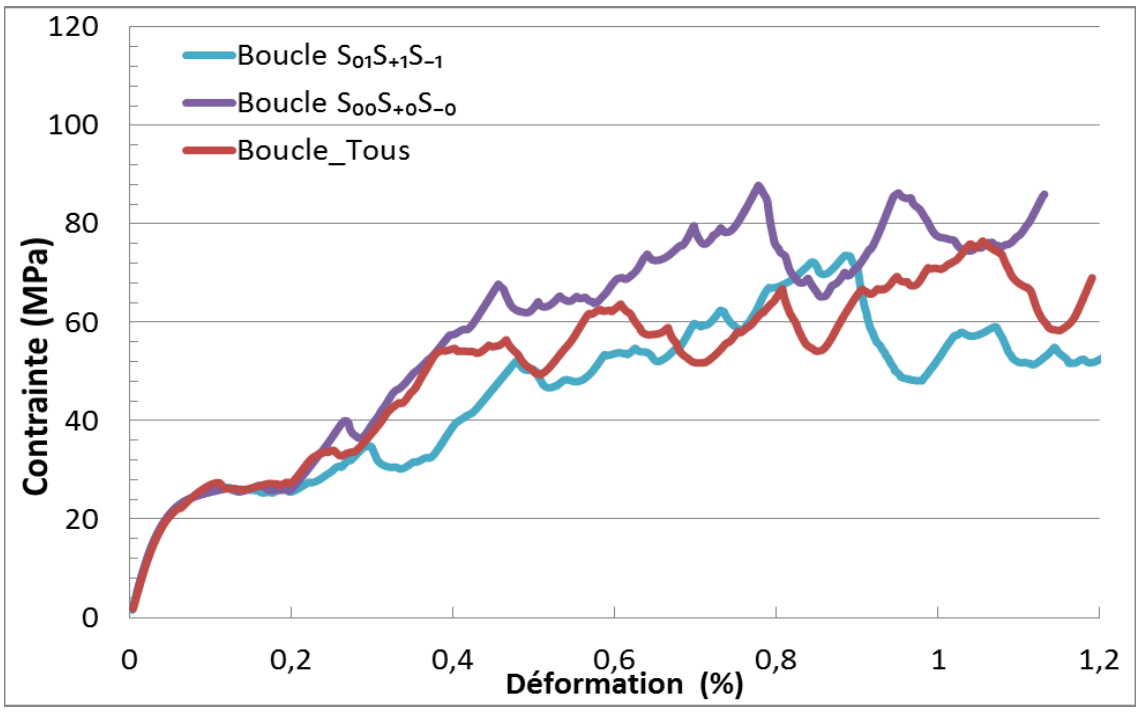


Figure 4.42 Courbe contrainte-déformation pour différents types de boucles mélangées dans une boite de simulation: boucles mélangées de type S_{00}, S_{+0} et S_{-0} en violet, boucles mélangées de type S_{01}, S_{+1} et S_{-1} en bleu, boucles de tous les six types en rouge.

Les courbes contrainte déformation calculées pour ces simulations sont reportées sur la Figure 4.42. Notons toutefois que la contrainte d'écoulement des boucles de côtés <100> (i.e. S_{00}, S_{+0} et S_{-0}) semble clairement supérieure à celle obtenue avec des boucles de côtés <110> (i.e. S_{01}, S_{+1} et S_{-1}). Ce résultat est une fois encore compatible avec nos simulations élémentaires et peut être justifié par une mobilité moindre des segments de boucles S_{x0} en cours de la réaction.

Il est également possible d'évaluer une force moyenne d'obstacle pour ces nouvelles simulations massives. Notre analyse nous conduit à une valeur d'environ $\alpha = 0{,}26$ pour les simulations avec une microstructure de boucle S_{x0} et pour la simulation avec un mixte de tous les types de boucles, cette valeur est en bonne accord avec la valeur de 0,34 obtenue en DD par Queyreau *et al.* [2009, 2010] ou estimée par l'expérience $\alpha = 0{,}3$ [Keh 1964]. On notera cependant que notre prédiction est plus faible que la valeur de $\alpha = 0{,}5 \sim 0{,}6$ déterminée macroscopiquement à partir des mesures de la limite d'élasticité après irradiation aux neutrons dans [Nicol *et al.* 2001] et [Hashimoto *et al.* 2001]. Il est raisonnable de penser que cet écart peut s'expliquer en grande partie par la faible amplitude de déformation modélisée lors de nos simulations. A la limite élastique, la contrainte d'écoulement mesurée expérimentalement est sans doute plus forte car cette mesure incorpore en partie un durcissement d'écrouissage lié à l'accumulation d'obstacles (double-crans et paquets de boucles en dessus et dessous des dislocations) le long des lignes de dislocation mobiles.

Aussi, on voit sans ambiguïté que lors de nos simulations à petite déformation la dislocation mobile se charge déjà en super-crans à mesure qu'elle absorbe des boucles (voir Figure 4.43 ci-dessous). Cette décoration au-delà d'un seuil va probablement modifier l'interaction dislocation-boucles puisque ces super-crans ne subissent plus la même cission critique que la dislocation rectiligne initiale et donc ils vont réduire la force motrice poussant la dislocation au travers des obstacles.

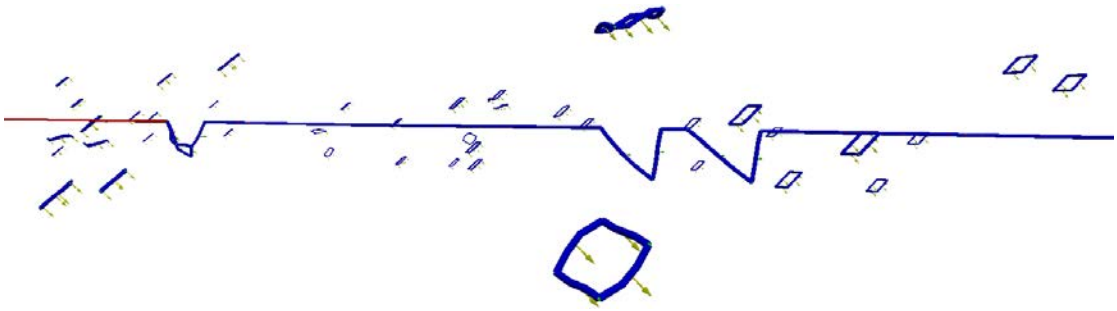


Figure 4.43 Capture de nouvelles boucles par une partie de la dislocation contenant des doubles-crans

L'état d'avancement de nos calculs ne nous permet pas de déterminer aujourd'hui si ces super-crans auront ou non un effet durcissant. On notera cependant qu'un phénomène similaire a été observé expérimentalement dans différents matériaux irradiés [Singh *et al.* 2003] ainsi que par DD durant la thèse de Nogaret [Nogaret 2007] sur des aciers inoxydables austénitiques.

Notons enfin qu'une analyse de la vitesse de disparition des boucles, fonction du déplacement de la dislocation, pourrait également être réalisée assez simplement par notre modèle et pourrait être introduite dans des équations de plasticité cristalline (ex : paramètre ξ dans le cadre de la loi de plasticité cristalline élaborée par [Monnet *et al.* 2013] ou un paramètre similaire utilisé par [Barton *et al.* 2013] et par [Li *et al.* 2014]). L'analyse des résultats de nos simulations élémentaires laisse en outre penser qu'il faut à nouveau distinguer les trois variants de boucles <100> dans ces équations pour chacun des douze systèmes de glissement envisagés. Cette piste est également un axe de développement intéressant pour la suite de ce travail.

Les résultats de ces premières simulations « massives » sont très préliminaires et doivent être confirmées sur des temps et des volumes plus importants. Ils nous permettent cependant d'identifier plusieurs pistes

intéressantes qui pourraient être étudiées dans un futur proche et fournir des paramètres utiles pour des lois de plasticité cristalline.

Conclusion

Les interactions élémentaires entre une dislocation *coin* et des boucles ½<111> et <100> ont été étudiées par DD, sur la base du modèle établi au chapitre 3, pour des configurations n'ayant pas servis à l'élaboration de ce modèle. Les résultats de ces calculs ont été systématiquement comparés à des résultats obtenus par DM et ont montré une cohérence, plus que satisfaisante, entre DM et DD.

Les effets de taille de boucles et de vitesse de déformation ont également été étudiés. Nous avons pu constater que la complexité des réactions et le durcissement induit s'amenuisait lorsque la taille de la boucle et la vitesse de déformation appliquée diminuaient. Des comparaisons avec les calculs de DM disponibles ont également montré un bon accord avec notre modèle, même si une meilleure identification des lois de mobilité est nécessaire notamment pour les vitesses de déformation les plus faibles.

Nous avons ensuite appliqué notre modèle au cas d'interactions élémentaires entre différents types de boucles et une dislocation *vis*. Une comparaison avec des résultats de DM a permis de valider la majeure partie des réactions étudiées ainsi que les contraintes critiques correspondantes. Des différences subsistent toutefois dans certains cas et ont pu être reliées à des mécanismes de scission de nœuds multiples qui ne sont pas pris en compte dans le code *NUMODIS*, mais qui pourraient l'être dans le futur.

S'appuyant sur la validité de notre modèle pour traiter les interactions individuelles, nous avons réalisé des premières simulations impliquant des densités de boucles <100> plus réalistes. Elles illustrent l'intérêt de ce type de modélisation mésoscopique pour dégager des informations intéressantes à l'échelle, plus macroscopique, de la plasticité cristalline. Nos premiers résultats ont permis de mettre en évidence un durcissement fonction de la nature des boucles en présence. L'utilisation du modèle d'Orowan pour évaluer la force moyenne des boucles d'irradiation permet de vérifier que notre modèle calcule une « résistance » des microstructures d'irradiation en excellent accord avec les valeurs obtenues expérimentalement.

Tous les outils sont maintenant en place pour extraire de nos simulations de DD les paramètres d'un modèle de plasticité cristalline mieux justifiés physiquement.

Bibliographie

[Ackland *et al.* 2004] G.J. Ackland, M.I. Mendelev, D.J. Srolovitz, S. Han, A.V. Barashev, J Phys: Condens Matter (2004)

[Bacon *et al.* 1973] D.J. Bacon, V.F. Kochs , R.O. Scattergood, Philos. Mag. 28 (1973) 1241

[Bacon *et al.* 2006] D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, Z. Rong, Philos. Mag. 86 (2006) 3921

[Barton *et al.* 2013] N.R. Barton, A. Arsenlis, J. Marian, J. Mech Phys Solids 61 (2013) 341

[Bulatov *et al.* 2001] V. V. Bulatov, M. Rhee, W. Cai, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 653 (2001) Z1.3.1

[Devincre 1994] B. Devincre, Thèse de Doctorat de l'Université d'Orsay (1994)

[Devincre *et al.* 2006] B. Devincre, L. Kubin a, T. Hoc, Scripta Mat. 54 (2006) 741

[Franciosi 1983] P. Franciosi, Acta Metall. 31 (1983) 1331

[Hashimoto *et al.* 2001] N. Hashimoto, S.J. Zinkle, R.L. Klueh, A.F. Rowecliff, K. Shiba, Materials Research Society Symposium Proceedings Volume 650 (2001) R1.10.1

[Keh 1964] A.S. Keh, Phil. Mag. Ser. 8 (1964) 12

[Li *et al.* 2014] D. Li, H. Zbib, X. Sun, Xin, M. Khaleel, International Journal of Plasticity, 52 (2014) 31

[Mendelev *et al.* 2003] M.I. Mendelev, S. Han, D.J. Srolovitz, G.J. Ackland, D.Y. Sunand, M. Asta, Philos. Mag. 83 (2003) 3977

[Monnet *et al.* 2013] G. Monnet, L. Vincent, B. Devincre, Acta Materialia 61 (2013) 6178

[Nicol *et al.* 2001] A.C. Nicol, M.L. Jenkins, M.A. Kirk, Mat. Res. Soc. Symp. 650 (2001) R1.3

[Nogaret 2007] T. Nogaret, Thèse de Doctorat de l'INP Grenoble (2007)

[Queyreau *et al.* 2009] S. Queyreau, G. Monnet, B. Devincre, International Journal of Plasticity, 25 (2009) 361

[Queyreau *et al.* 2010] S. Queyreau, G. Monnet, B. Devincre, Acta Materiala, 58 (2010) 5586

[Singh *et al.* 2003] B.N. Singh, S. Tähtinen, P. Moikanen, P. Jacquet, J. Dekyser, J. Nucl. Mater., 320 (2003) 299

[Terentyev *et al.* 2008] D. Terentyev, P. Grammatikopoulos, D.J. Bacon, Y.N. Osetsky, Acta Materialia, 56 (2008) 5034

[Terentyev *et al.* 2009] D. Terentyev, Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, Philos. Mag, 90 (2010) 1019

[Terentyev *et al.* 2010] D. Terentyev, Y.N. Osetsky, D.J. Bacon, Scripta Mat. 62 (2010) 697

[Terentyev 2014] Communications privées.

[Zinkle *et al.* 2006] S.J. Zinkle, B.N. Singh, J.Nucl.Mater. 351 (2006) 269

Conclusion et perspective générale

1. Conclusion générale

Le travail de recherche présenté dans ce mémoire a consisté à proposer un modèle de simulation dans un code nodal de Dynamiques des Dislocations NUMODIS pour étudier les effets de durcissement d'irradiation provoqués par des boucles de dislocation dans le régime athermique du monocristal de fer, de structure Cubique Centrée. Notre point de comparaison pour tester et valider notre modèle était l'ensemble des résultats publiés en Dynamique Moléculaire portants sur les interactions entre des dislocations coins ou vis avec différents types de boucles. Nous avons dû faire évoluer le code NUMODIS pour que nos conditions de simulations s'approchent le plus possible de celles utilisées en DM. Plusieurs points ont ainsi été développés et améliorés dans le code : ajout d'un système de pilotage en vitesse de déformation imposée, mise en place des conditions aux limites périodiques, identification des paramètres rayon de cœur 'a' et énergie de cœur 'α_{core}', etc.

Dans la cadre de la théorie élastique, une loi de mobilité visqueuse linéaire, typique du régime athermique, est utilisée dans notre modèle pour chaque système de glissement.

$$v^s = \frac{< \left|\tau_{eff}^s\right| - \tau_0^s >* b}{B^s} \tag{38}$$

Les valeurs de τ_0^s (la contrainte de friction ou la contrainte de seuil dans son plan de glissement 's') et de B^s (le coefficient de viscosité dans son plan de glissement 's') ont été identifiés pour chaque système actif ainsi que le nombre et le type de systèmes de glissement nécessaires pour reproduire convenablement les mécanismes d'interaction observés en DM entre une dislocation coin et des boucles de type <100> ou ½<111>. Une étude bibliographique nous a permis de choisir un jeu de valeurs initiales cohérent pour les paramètres τ_0^s et B^s, complété notamment par l'analyse des contraintes critiques nécessaires pour décrocher les dislocations des boucles (voir Table 1).

Table 1 : Les valeurs identifiées pour le coefficient de viscosité et la contrainte de friction dans différents systèmes de glissement.

$\vec{b}$ Burgers	Plans	B (10^{-5} Pa*s)	τ_0 *(MPa)*
½<111>	{110}	8	10
½<111>	{112}	8	10
½<111>	{123}	8	10
<100>	{110}	80	300
<100>	{100}	9000	300

Une simulation d'interaction à longue distance sans contact a ensuite été effectuée et nous avons pu reproduire là-encore les résultats des simulations de DM pour ce type de conditions.

L'effet de la taille des boucles ainsi que de la vitesse de déformation appliquée a par ailleurs été étudié et nous avons pu montrer que :

- globalement la contrainte critique augmente avec la vitesse de déformation, ce qui n'est pas une surprise en soit compte tenu de la loi de mobilité visqueuse retenue.
- Selon la taille et le type de boucle, certaines modifications des mécanismes de réaction peuvent avoir lieu avec à chaque fois une variation significative de la contrainte critique associée. Il convient donc de rester prudent dans la généralisation ou l'extrapolation des résultats observés sur une configuration de simulation particulière.

Nous pouvons conclure à ce stade que la taille des boucles et la vitesse de déformation appliquée ont des effets importants sur le comportement du fer.

Le modèle de DD a ensuite été appliqué au cas de simulations élémentaires entre une dislocation vis et les différents types de boucles déjà testées avec la dislocation coin. A cette étape, des difficultés ont été rencontrées dans le code de DD pour reproduire convenablement l'ensemble complet des réactions observées en DM. Le problème rencontré est maintenant compris et des travaux seront réalisés dans un proche avenir afin d'améliorer la représentativité de notre modèle. Toutefois, même si certains mécanismes de réaction peuvent varier entre nos calculs de DD et ceux de DM, les niveaux de contrainte obtenus pour décrocher la dislocation de ses obstacles en DD reste cohérente avec les résultats de DM.

Nous pouvons donc conclure que l'application de notre modèle aux simulations élémentaires entre les dislocations de différents caractères et les différents types de boucles est tout à fait satisfaisante. Les différences trouvées, dans certaines configurations, par rapport aux résultats de DM sont justifiables et découlent du choix initial de la thèse de proposer un modèle pour le code NUMODIS le plus simple possible (élasticité isotrope, loi de mobilité linéaire, non prise en compte du glissement dévié, etc. …).

Finalement, des premières simulations massives ont été effectuées impliquant un grand nombre de boucles de différents types. Ces premières simulations montrent l'avantage et l'intérêt d'une modélisation à l'échelle mésoscopique par rapport aux simulations atomiques. Citons par exemple, la possibilité d'étudier des distributions hétérogènes en nombre, en taille et en type de défauts au sein du volume simulé, le recours à une vitesse de dislocation moins grande et plus proche de celle rencontrée expérimentalement, ou à terme le fait de pouvoir étudier le développement des microstructures de dislocations en présence de défauts.

Bien que nos calculs massifs soient encore limités par l'utilisation d'une version séquentielle du code NUMODIS et donc des temps de calculs longs, nos premiers résultats sont très encourageants. Ils montrent qu'il est possible avec notre modèle mésoscopique de calculer, par exemple, des valeurs de force d'obstacle pour différentes conditions d'irradiations et à l'échelle d'un volume élémentaire de la mécanique des milieux continus. Ainsi nous avons déjà, en accord avec l'expérience, calculé un durcissement moyen de l'ordre de $\alpha = 0{,}26$ pour les boucles d'irradiation les plus observées dans le Fer. Ce résultat peut d'ores et déjà être utilisé dans une loi de plasticité cristalline pour des simulations à une échelle plus grande.

2. Perspectives

La proposition et l'application de notre nouveau modèle de DD pour étudier les effets d'irradiation des boucles de dislocation nous a permis d'avancer dans notre démarche de faire un lien entre les résultats obtenus à l'échelle atomique et les paramètres de durcissement d'irradiation à identifier physiquement dans les lois de la plasticité cristalline. Les perspectives de ces travaux sont multiples et reposent sur de futurs développements pour parties techniques ou fondamentaux.

Il est urgent de porter l'ensemble des développements réalisés durant la thèse dans la version parallèle de NUMODIS, afin d'entreprendre une étude plus systématique de notre modèle pour les conditions de simulations massives. De même, la question de l'utilisation de l'élasticité anisotrope est un point de débat, même si nos premiers résultats suggèrent fortement que cette complexité additionnelle n'est pas essentielle pour la modélisation mésoscopique puisque l'ensemble des résultats de DM sont déjà bien reproduits avec l'élasticité isotrope.

Pour certaines simulations réalisées dans NUMODIS, nous n'arrivons pas à reproduire les mêmes réactions que celles observée en DM. Par exemple, un glissement dévié a pu être observé en DM pendant certaines interactions entre dislocation et boucles, et il faut donc introduire cette possibilité dans le code de DD. Dans d'autre cas, de nouveaux algorithmes de créations de jonctions doivent être implantés dans le code, comme la possibilité de scinder un nœud en trois nouveaux nœuds reliés par deux jonctions. Ce type d'algorithme devrait améliorer sensiblement la description des mécanismes d'interaction entre une dislocation vis et les boucles de type <100>.

Faute de temps, nous n'avons pas pu étudier les effets d'autres défauts d'irradiation comme les cavités avec notre modèle. Il serait aussi très intéressant d'étudier les effets de ce type de défauts sur le comportement du Fer, incluant notamment une distribution de ces différents défauts.

A plus long terme, les mêmes études mais à basse température, avec de nouvelles lois de mobilité des dislocations thermiquement activées, seront nécessaires afin d'étudier la transition de comportement entre le régime thermique et le régime athermique dans les matériaux irradiés.

ANNEXE A : Le paramètre de rayon de cœur 'a'

L'analyse des simulations réalisées a montré que les interactions pouvaient dépendre de la valeur du paramètre de rayon de cœur 'a'. La contrainte d'activation d'une source de Franck-Read dépend elle-aussi de ce paramètre. Dans la littérature, la valeur de 'a' varie d'un b jusqu'à une trentaine de b, il n'y a pas une valeur unique pour tous les cas de simulations. Jusqu'à présent, la valeur de ce paramètre avait donc été choisie de manière arbitraire dans le code et nous proposons ici une méthode pour la définir en nous appuyant sur les résultats de MD obtenus par Clouet [Clouet 2009][4].

Dans l'article [Cai *et al.*2006][5] sont fournies les expressions des champs de contrainte pour une dislocation vis rectiligne infinie ainsi que pour une dislocation coin rectiligne infinie. A partir de ces formules, l'énergie des dislocations est introduite avec le paramètre 'a'.

Pour une dislocation vis rectiligne infinie, la seule composante non nulle du champ de contrainte dans un repère cylindrique est la suivante :

$$\sigma_{\theta z}(\text{vis}) = \frac{\mu b}{2\pi}\frac{r}{\rho_a^2}\left(1+\frac{a^2}{\rho_a^2}\right) \text{ avec } \rho_a^2 = a^2 + r^2$$

L'énergie élastique contenue dans un cylindre de rayon R s'obtient par la relation suivante :

$$E_{vis}^{Cai}(R) = \frac{1}{2}\frac{\mu b^2}{4\pi}\left\{\log\left(1+\frac{R^2}{a^2}\right)+\frac{1}{6}\frac{R^2(R^4-3a^2R^2-6a^4)}{(a^2+R^2)^3}\right\}$$

Avec un développement limité pour $a \ll R$, on obtient l'équation d'énergie finale :

$$E_{vis}^{elas}(R) = \frac{\mu b^2}{4\pi}\left\{\log\left(\frac{R}{a}\right)+\frac{1}{12}\right\}+\mathcal{O}\left(\frac{a^2}{R^2}\right)$$

Le même calcul est réalisé pour l'énergie d'une dislocation coin rectiligne infinie et on obtient l'équation d'énergie finale suivante :

$$E_{coin}^{Cai}(R) = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-v)}\log\left(\frac{R}{a}\right)-\frac{\mu b^2}{48\pi}\frac{2+v}{(1-v)^2}+\mathcal{O}\left(\frac{a^2}{R^2}\right)$$

Comme il n'y a pas de terme croisé dans le tenseur de contrainte de la dislocation vis et de la dislocation coin, l'énergie élastique d'une dislocation mixte est la somme de l'énergie de la composante vis et de l'énergie du composant coin.

$$E_{mixte}^{Cai}(R) = \frac{\mu b^2}{4\pi}\left[cos^2\theta+\frac{sin^2\theta}{1-v}\right]\log\left(\frac{R}{a}\right)-\frac{\mu b^2}{48\pi}\left[-cos^2\theta+\frac{2+v}{(1-v)^2}sin^2\theta\right]$$

[4] [Clouet 2009] E. Clouet, Philos. Mag. 89 (2009) 1565

[5] [Cai *et al.* 2006] Wei Cai, A. Arsenlis, C.R. Weinberger, V.V. Bulatov, J. Mech. Phys. Sol. 54 (2006) 561

L'énergie d'une dislocation obtenue ci-dessus peut être comparée avec les résultats obtenus dans la théorie élastique classique (la méthode singulière), d'après laquelle l'énergie stockée par une dislocation rectiligne infinie dans un cylindre de rayon *R* est :

$$E^{Total}(R) = \frac{1}{2} b_i k_{ij} b_j \ln\left(\frac{R}{r_c}\right) + E^{core}$$

Avec *k* la matrice de stock dépendant des constantes élastiques C_{ij} et du caractère de la dislocation. E^{core} est l'énergie de coeur de la dislocation dépendant de son caractère et est donnée pour une valeur fixée du rayon de cœur r_c en supposant que la coupure $R = 10^4 r_c$.

Comme le formalisme dans l'article [W. Cai *et al.* 2006] est exprimé dans l'approximation de l'élasticité isotrope, il faut faire un choix arbitraire dans la définition des constantes élastiques μ et v.

On impose que la partie élastique de l'énergie d'une dislocation soit exacte pour les orientations purement vis et purement coin.

$$\frac{\mu b^2}{4\pi} = \frac{1}{2} K_{vis} b^2 \quad et \quad \frac{\mu b^2}{4\pi(1-v)} = \frac{1}{2} K_{coin} b^2$$

Donc $\mu = 2\pi K_{vis} \quad et \quad v = 1 - \frac{K_{vis}}{K_{coin}}$.

Dans ces études, nous avons utilisé les valeurs suivantes :

C_{11}(GPa)	C_{12}(GPa)	C_{44}(GPa)
243	145	116
μ(GPa)	v	b (Å)
64.47	0.47	2.473

Tableau A.1 Les valeurs des paramètres utilisées

A priori, 'a' doit dépendre du caractère de la dislocation mais cette valeur est déterminée en imposant l'égalité de l'énergie (tout en négligeant l'anisotropie élastique) et on obtient la formule suivante :

$$a = r_c \exp\left\{ -\frac{-\frac{1}{12}cos^2\theta + \frac{1}{12}\frac{2+v}{(1-v)^2}sin^2\theta + \frac{4\pi}{\mu b^2}E^{core}(\theta)}{cos^2\theta + \frac{1}{1-v}sin^2\theta} \right\}$$

Pour une dislocation vis ($\theta = 0^\circ$) :

Annexe A : Le paramètre de rayon de cœur 'α'

$$a = r_c \exp\left\{\frac{1}{12} - \frac{4\pi}{\mu b^2} E_{vis}^{core}\right\}$$

Pour une dislocation coin ($\theta = 90^{\circ}$) :

$$a = r_c \exp\left\{\frac{1}{12} \times \frac{2+v}{1-v} - \frac{4\pi}{\mu b^2} E_{coin}^{core}(1-v)\right\}$$

Nous avons aussi la formule de l'énergie de cœur en fonction du caractère de la dislocation et pour un paramètre 'a' fixé :

$$E^{core}(\theta) = \frac{\mu b^2}{4\pi}\left[cos^2\theta + \frac{sin^2\theta}{1-v}\right]\log\left(\frac{r_c}{a}\right) - \frac{\mu b^2}{48\pi}\left[-cos^2\theta + \frac{2+v}{(1-v)^2}sin^2\theta\right]$$

La valeur 'a' peut être obtenue à partir de toutes ces relations si l'on connaît la valeur $E^{core}(\theta)$ et en supposant que $r_c = b$. Dans la théorie élastique classique, on connait déjà l'énergie totale d'une dislocation rectiligne infinie qui se compose de l'énergie élastique et de l'énergie de cœur. La partie d'énergie élastique peut être exprimée dans une formule analytique exacte en fonction du caractère de la dislocation, l'énergie totale peut être obtenue à l'aide des simulations en MD. La Figure A.1 nous montre l'énergie de cœur en fonction du caractère de la dislocation :

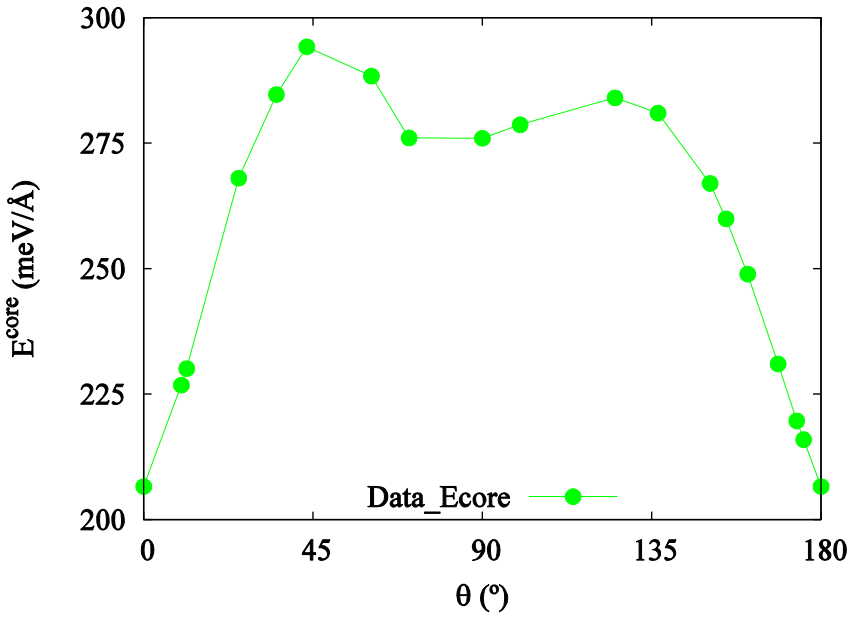


Figure A.1 Energie de cœur en fonction du caractère de la dislocation ($r_c = b$)

Puis on obtient la valeur de 'a' en fonction du caractère de la dislocation (Figure A.2) :

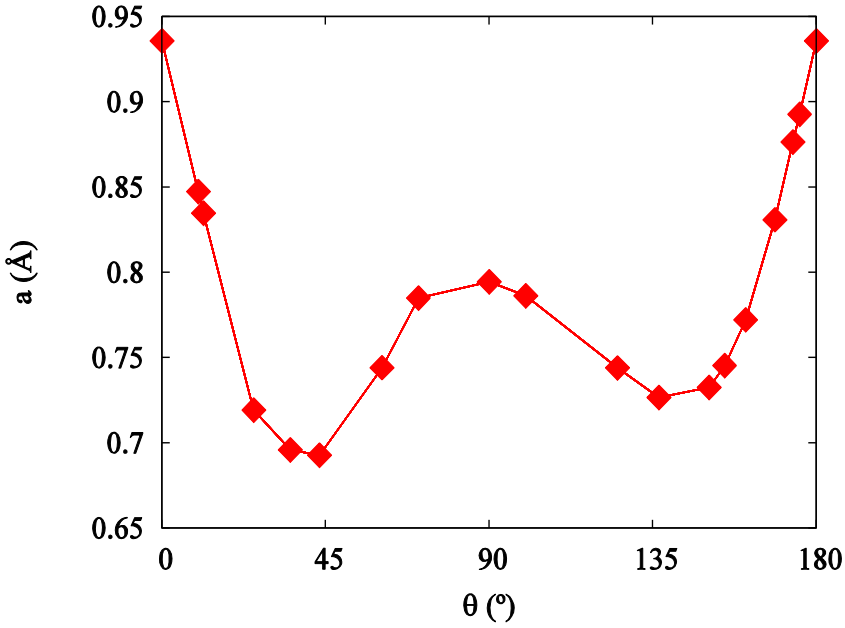


Figure A.2 La valeur de rayon de cœur 'a' en fonction du caractère de la dislocation

Afin de simplifier les simulations que nous avons réalisées dans NUMODIS, la valeur 'a' est supposée unique pour tous les caractères de dislocation. Avec une valeur 'a' fixée, on peut calculer l'énergie de cœur en fonction du caractère de la dislocation.

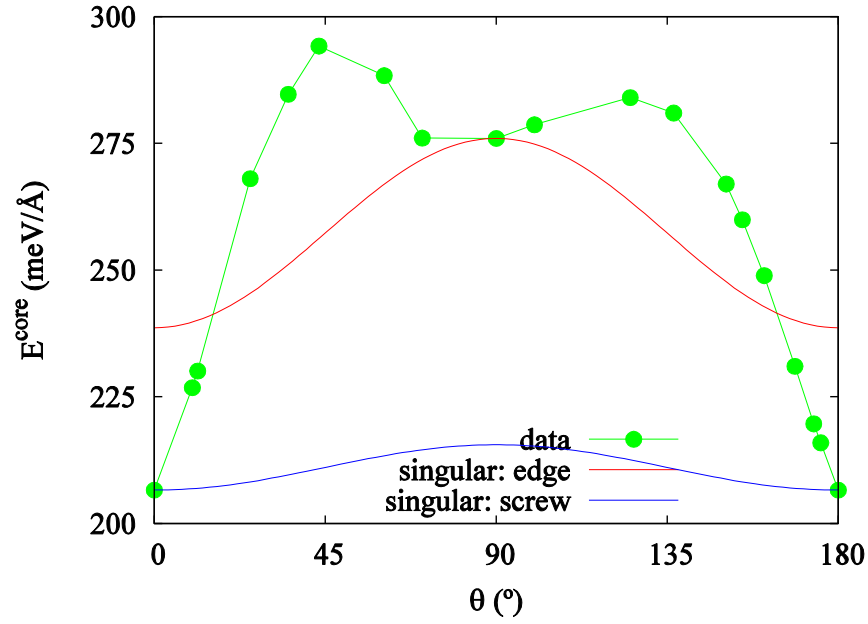


Figure A.3 Les courbes d'énergie obtenues en identifiant la valeur 'a' pour la vis et la coin

La Figure A.3 nous montre comment l'énergie de cœur est reproduite quand le paramètre d'étalement 'a' est fixé de telle sorte que celle-ci passe par l'énergie de cœur de la dislocation vis ou de la dislocation coin.

L'énergie de cœur a ensuite été calculée ainsi que l'énergie totale d'une dislocation coin en faisant varier le rayon de coupure avec la valeur '$a=0.8$' obtenue pour la dislocation coin. La Figure A. 4 nous montre la bonne cohérence du calcul d'énergie d'une dislocation entre la méthode non-singulière de [Cai *et al.*2006] et la méthode classique.

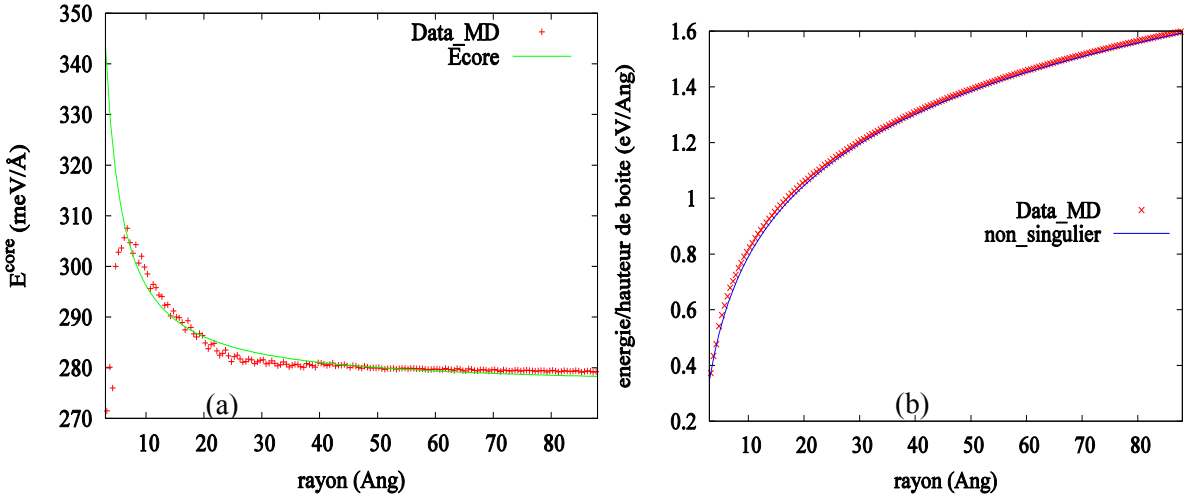


Figure A. 4 (a) L'énergie de cœur de la dislocation coin (b) L'énergie totale de la dislocation coin