

Plasticité et rupture : exemples de modélisation

La prédiction du comportement mécanique d'un matériau à une échelle choisie peut être fondée sur des lois physiques écrites et, si possible, validées aux échelles inférieures. La nécessaire compréhension préalable à la prédiction utilise donc les modélisations physiques à différentes échelles, avec leurs propres approximations et des méthodes de changement d'échelles généralement numériques. Ce type d'approche est maintenant reconnu à travers le monde comme complément possible, bien que, de longue haleine, aux méthodes empiriques utilisées conventionnellement dans l'industrie nucléaire pour prédire le vieillissement et le comportement mécanique en service et en condition exceptionnelle des matériaux. En fait, si les réacteurs peuvent être construits à l'aide de règles conventionnelles, la démonstration de leur efficacité et de leur résistance sera, certainement, de plus en plus appuyée sur une démarche fondée sur la physique.

Cette section a pour objet de présenter, dans ce contexte, une série d'exemples d'application de modélisation physique en mécanique des matériaux qui mettent en œuvre diverses méthodes de modélisation présentées précédemment. La plasticité des solides est due au mouvement des **dislocations***, c'est pourquoi l'étude de leurs propriétés et de leur mobilité revêt une importance particulière : c'est l'objet des deux premiers chapitres. Ceux-ci se concentrent sur le cas de la dislocation vis qui présente un comportement singulier dans les métaux cubiques centrés et hexagonaux. Ces travaux apportent des ingrédients indispensables aux échelles supérieures permettant d'accéder à des lois physiques dans un

domaine où le recours à l'expérience est difficile voire impossible. Les chapitres suivants présentent des applications à différents phénomènes comme la **fatigue***, le **fluage*** thermique et d'irradiation, l'**endommagement*** par cavité, la **rupture*** fragile... Ces exemples ont recours à des modélisations faisant intervenir au moins deux échelles : l'échelle macroscopique, au niveau de la prédiction, et des échelles inférieures où sont décrits les mécanismes de déformation et d'endommagement. Les sujets présentés ici relèvent des problématiques « matériaux » des réacteurs actuels et futurs. Leur diversité souligne la richesse et le potentiel de l'approche multi-échelles en science des matériaux.

Le calcul *ab initio* de la plasticité : structure de cœur et mécanismes de glissement des dislocations vis

La plasticité des matériaux est gouvernée par le mouvement des **dislocations***, qui sont des défauts linéaires du réseau cristallin (voir *supra*, p. 15, l'encadré consacré aux cristaux et leurs défauts). Alors que les interactions à longue portée entre dislocations sont bien décrites par la théorie élastique continue, le glissement des dislocations et les interactions avec le réseau à courte portée dépendent sensiblement des mécanismes à l'échelle atomique, dans la région du cœur de la dislocation. Afin de décrire ces mécanismes locaux, comme la vitesse et le plan de glissement, ainsi que les interactions avec les défauts du réseau et les impuretés qui sont des données d'entrée de la dynamique des dislocations, on a recours aux simulations numériques à l'échelle atomique, *via* des niveaux de descriptions emboîtés (*ab initio*, dynamique moléculaire). Les calculs *ab initio* permettent d'obtenir une description de la structure de cœur des dislocations, là où la réorganisation des liaisons atomiques est trop importante pour être décrite par la théorie élastique, mais également de prédire leurs plans de glissement, ainsi que la contrainte de cisaillement résolue minimale à appliquer pour activer ce glissement, sans l'aide de fluctuations thermiques (**contrainte de Peierls***) ou bien les barrières énergétiques nécessaires pour activer thermiquement le glissement par un mécanisme de germination et propagation de doubles décrochements (fig. 152).

Toutefois, les champs élastiques à longue portée des dislocations engendrent des difficultés pour les simulations atomistiques, limitées dans les échelles spatiales et temporelles. Par exemple, une dislocation peut créer des contraintes sur l'échelle du micron, loin de l'échelle nanométrique accessible par calcul *ab initio*. Par conséquent, les résultats des simulations atomistiques peuvent facilement présenter des artefacts, si les conditions aux limites ne sont pas traitées proprement. Pour cela, des conditions aux limites prenant en compte le champ élastique à longue portée sont mises en œuvre, afin d'étudier sur des cellules de taille réduite accessibles par les calculs *ab initio* les dislocations rectilignes et avec décrochements, dans les métaux de transition de structure, soit cubique centrée (V, Nb, Ta, Cr, Mo, W et Fe), soit hexagonale compacte (Zr, Ti, par exemple).

La plasticité des métaux cubiques centrés

Expérimentalement, les métaux cubiques centrés (cc) diffèrent des métaux cubiques à faces centrées (cfc) pour lesquels les dislocations conventionnelles sont dissociées et glissent facilement. Dans les métaux cc, à basse température, la mobilité des dislocations est limitée par leur segment vis, rectiligne,

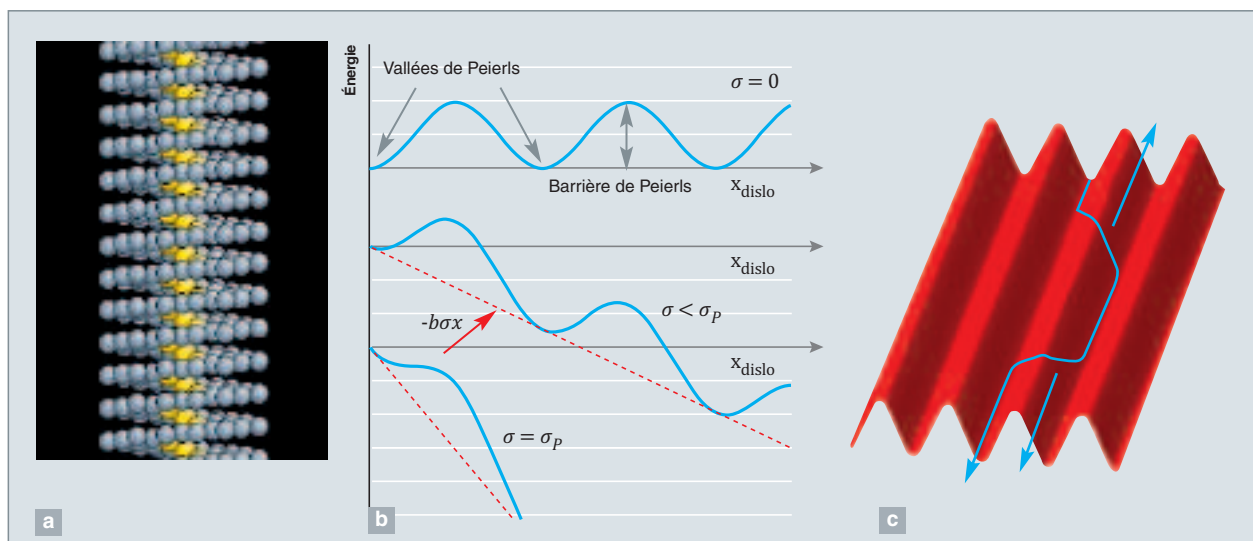


Fig. 152. a) Représentation schématique de la région de cœur d'une dislocation vis. b) Énergie potentielle de la dislocation en fonction de sa position (énergie de Peierls) pour une contrainte appliquée nulle, inférieure à la **contrainte de Peierls*** σ_p qui permettrait le glissement de la dislocation, et supérieure à σ_p . c) Franchissement des vallées de Peierls *via* la nucléation puis la propagation de doubles décrochements le long de la ligne de dislocation.

de **vecteur de Burgers*** $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$, de plan de glissement $\{110\}$ et de contrainte de Peierls élevée. En effet, à basse température, les dislocations vis sont soumises à des forces de friction de réseau importantes dues à des vallées de Peierls profondes, alors qu'à plus haute température, les métaux cc sont plus proches des cfc.

À l'échelle atomique, les calculs *ab initio* effectués dans les métaux de transition cc purs (V, Nb, Ta, Cr, Mo, W et Fe) mettent en évidence une structure de cœur de dislocation vis non dégénérée – c'est-à-dire présentant une extension de cœur symétrique dans les trois plans $\{110\}$ de la zone $\langle 111 \rangle$ – en désaccord avec les potentiels empiriques, qui prédisent, pour la plupart, une structure de cœur dégénérée – autrement dit avec une extension asymétrique dans les plans $\{110\}$ [1, 2]. Ce résultat est essentiel pour les mécanismes de glissement, car au-delà de la contrainte de Peierls, le plan de glissement est corrélé à la structure de cœur. En effet, les cœurs non dégénérés glissent dans des plans $\{110\}$ d'après les calculs *ab initio* et en accord avec l'expérience, alors que les cœurs dégénérés conduisent à un plan de glissement moyen $\{211\}$. **L'adoucissement/durcissement*** par solution solide a été mis en évidence dans Mo par les calculs *ab initio* [3]. Les calculs *ab initio* montrent aussi que l'ajout d'impuretés, comme Re dans W ou Co dans Fe, provoque une brisure de symétrie du cœur, conduisant à une structure de cœur dégénérée, et donc à un changement de plan de glissement [4, 5]. Par ailleurs, les calculs *ab initio* aboutissent à une dilatation perpendiculairement à la ligne de dislocation et à une contraction parallèlement à celle-ci correspondant à un champ de cœur qui se superpose au **champ de Volterra*** et qui peut être décrit quantitativement par un modèle d'élasticité anisotrope [6]. On s'attend alors à avoir des effets physiques de ce champ de cœur, sur l'interaction d'une dislocation avec un champ de pression, par exemple.

Du point de vue énergétique, les calculs *ab initio* permettent de décrire quantitativement le **potentiel de Peierls*** à deux

dimensions des dislocations vis rectilignes. La barrière de Peierls entre deux positions stables voisines dans le plan de glissement ne montre en *ab initio* aucune configuration de cœur métastable à mi-chemin dans tous les métaux de transition cc, en contradiction avec la barrière de Peierls en double bosse prédite dans le fer par les potentiels empiriques reproduisant la structure de cœur non dégénérée, comme le potentiel de Mendeleev [1]. La configuration intermédiaire métastable prédite en potentiel empirique (appelée « cœur dissocié ») est un artefact du potentiel empirique, qui peut avoir des conséquences sur les mécanismes de glissement. Les calculs *ab initio* montrent que le fer se démarque des autres éléments par un col en forme de selle de singe, au lieu d'un maximum local à la position de cœur dite difficile [2]. Des potentiels empiriques pour le fer et le tungstène ajustés sur la barrière de Peierls *ab initio* sont actuellement développés pour reproduire la structure de cœur non dégénérée et la barrière de Peierls en simple bosse mais ne reproduisent pas toutes les caractéristiques, en particulier le col en selle de singe dans le fer [7] (fig. 153).

La contrainte de Peierls correspond à la contrainte qui annule la barrière de Peierls et peut donc être calculée à partir de la dérivée maximale de la barrière de Peierls par rapport à la position de la dislocation, si l'on suppose que la barrière est indépendante de la contrainte appliquée (fig. 152b). Les calculs *ab initio* et en potentiel empirique conduisent à des contraintes de Peierls trop élevées par rapport aux valeurs expérimentales d'un facteur trois environ. Par exemple, dans le fer, la contrainte de Peierls extraite des simulations *ab initio* est de l'ordre de 1,3 GPa, alors que la valeur expérimentale est proche de 0,4 GPa. L'origine de ce désaccord fait l'objet de plusieurs hypothèses, mais des travaux récents montrent qu'il provient certainement d'un effet quantique [8] lié au fait que les mesures expérimentales sont réalisées à très basses températures (quelques K). Par ailleurs, des simulations en potentiel empirique montrent que le potentiel de Peierls dépend de la contrainte appliquée [9]. L'effet des contraintes

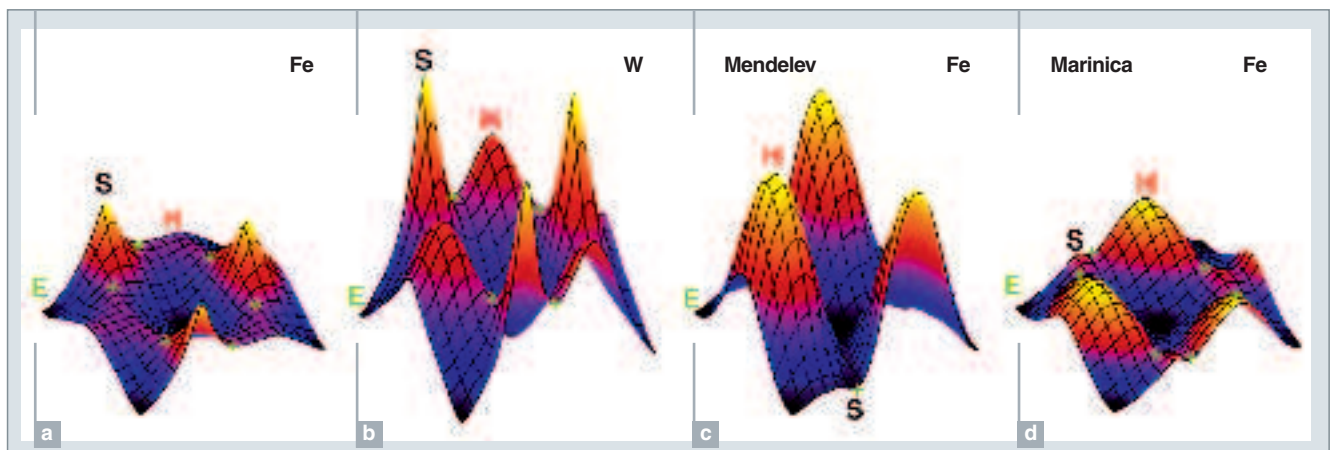


Fig. 153. Potentiel de Peierls bidimensionnel obtenu à partir de calculs *ab initio* (a) dans le fer et (b) dans le tungstène, et à partir des potentiels empiriques (c) de Mendeleev (le plus utilisé actuellement) et (d) de Marinica (développé au CEA) dans le fer.

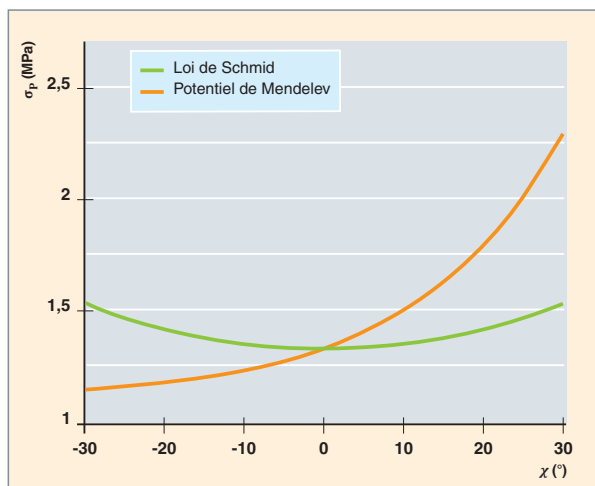


Fig. 154. Dépendance de la contrainte de Peierls avec l'angle χ entre le plan de cisson résolue maximale et le plan de glissement, calculée avec le potentiel de Mendeleev dans le fer.

non glissiles, c'est-à-dire qui ne produisent pas de force sur les dislocations, dans leur plan de glissement, et des asymétries du cristal peut être mis en évidence en soumettant la cellule de simulation à des contraintes appliquées croissantes, jusqu'à ce que la dislocation commence à glisser spontanément et donc atteigne la contrainte de Peierls. La figure 154 montre la dépendance de la contrainte de Peierls avec l'angle χ (angle entre le plan de cisson résolue maximale et le plan de glissement) obtenue dans le fer en potentiel empirique. La contrainte de Peierls est plus faible dans la région de maillage ($\chi < 0$) que dans la région d'antimaillage ($\chi > 0$), alors que la loi de Schmid, vérifiée dans les métaux cfc, par exemple, stipule que le glissement commence dès que la cisson résolue atteint une valeur critique indépendante de l'angle χ . Cet écart à la loi de Schmid est une conséquence directe de l'effet de l'orientation de la déformation (asymétrie maillage/antimaillage) caractéristique de la plasticité des métaux cc. Les différences obtenues en *ab initio* sur le potentiel de Peierls entre le fer et les autres métaux de transition cc peuvent être reliées aux différences observées expérimentalement sur l'asymétrie maillage/antimaillage.

En deçà de la contrainte de Peierls, la barrière d'énergie peut être localement franchie par activation thermique *via* la nucléation et la propagation de doubles décrochements. Dans les métaux cc, le double décrochement est constitué de deux simples décrochements. Pour des raisons de symétrie, les deux décrochements ne sont pas équivalents, mais leur étalement est proche, de l'ordre de $20b$ dans le fer, où b est le vecteur de Burgers. Ces calculs montrent, par ailleurs, que l'énergie de formation du double décrochement dans le fer est de 0,6 eV, en accord avec l'estimation expérimentale [10]. Des résultats préliminaires en *ab initio* dans le fer démontrent la faisabilité de ces calculs, mais demandent des tailles de

cellules plus grandes pour atteindre des énergies convergées. Une approximation par un modèle de tension de ligne est cependant possible et permet de calculer l'enthalpie d'activation de la paire de décrochements uniquement à partir de la barrière de Peierls et de la tension de ligne calculées en *ab initio* [11].

La plasticité du zirconium

La plasticité du zirconium est principalement contrôlée par les dislocations de vecteur de Burgers $\vec{b} = 1/3 \langle 11\bar{2}0 \rangle$ glissant dans les plans prismatiques de la maille hexagonale. Ce glissement prismatique et non basal, observé pour certains métaux de transition cristallisant dans la structure hexagonale compacte comme le zirconium, est dû à un étalement des dislocations dans les plans prismatiques. De précédentes études, à l'échelle atomique, réalisées en liaisons fortes [12] ont montré que cet étalement était lié aux amplitudes relatives des énergies de faute d'empilement dans les plans de base et de prisme. Ces énergies de faute d'empilement dépendent elles-mêmes du nombre d'électrons de valence présents dans la bande d et du caractère angulaire des liaisons interatomiques. Par conséquent, les potentiels à force centrale (potentiels EAM ou du second moment), couramment utilisés pour modéliser les métaux, ne sont pas adaptés pour décrire les propriétés de cœur des dislocations dans le zirconium : une meilleure description de la structure électronique s'avère nécessaire, ce que permet le calcul *ab initio*.

Les fautes d'empilement généralisées, obtenues en déplaçant deux demi-cristaux, l'un par rapport à l'autre, sans dislocation, ont été calculées dans les plans de base et de prisme en *ab initio*, et les résultats mettent en évidence l'existence d'un minimum local pour chacun de ces plans (fig. 155). Il est donc possible d'envisager la dissociation d'une dislocation parfaite en deux dislocations partielles dans chacun de ces plans.

À partir des valeurs de l'énergie de faute d'empilement pour chacun de ces minima et des constantes élastiques, le critère de Legrand [12] prédit alors une dissociation dans le plan prismatique. Cela est confirmé par les calculs *ab initio* de la structure de cœur d'une dislocation vis [13-16] : partant d'une structure initiale correspondant à une dislocation parfaite, la minimisation de l'énergie par rapport aux positions atomiques conduit naturellement à une structure s'étalant dans le plan prismatique (fig. 156a). Cet étalement peut alors être caractérisé en extrayant des calculs *ab initio* la discontinuité de déplacement causée par la dislocation le long du plan prismatique. La dérivée de cette fonction correspond à la densité de dislocation dans ce même plan. Cela permet de voir qu'une dislocation vis de vecteur de Burgers $\vec{b} = 1/3 \langle 11\bar{2}0 \rangle$ se dissocie en deux dislocations partielles purement vis de vecteur de Burgers $\vec{b}/2$ (fig. 156b), en accord avec les calculs d'énergie de faute d'empilement. Les calculs *ab initio* montrent, par ailleurs, qu'une dislocation vis dissociée dans le plan basal est

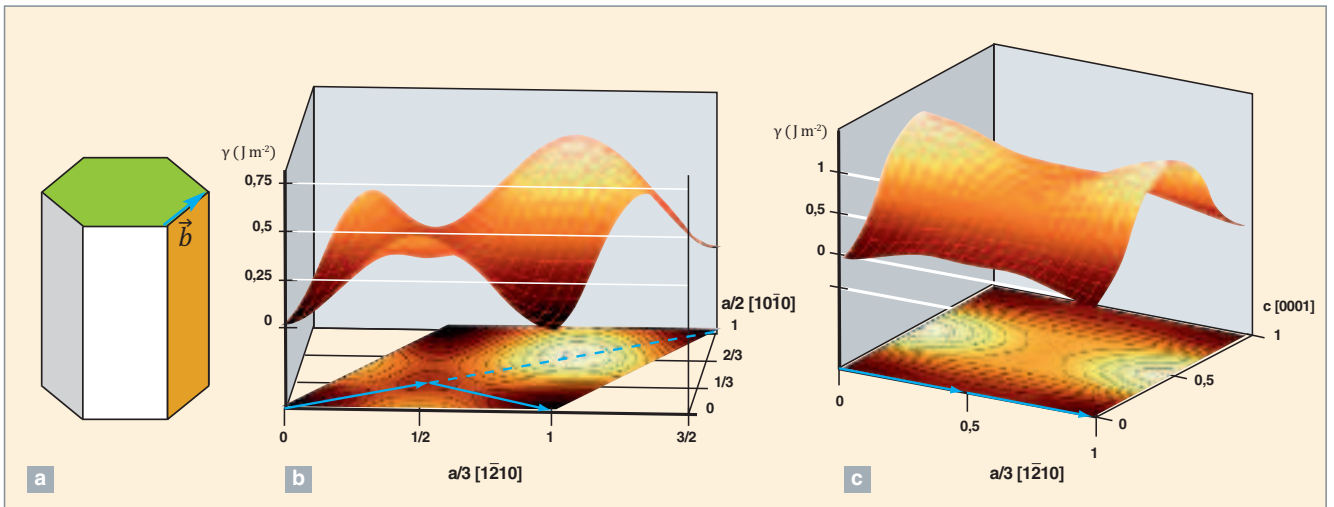


Fig. 155. a) Schéma de la maille hexagonale représentant le vecteur de Burgers \vec{b} et les différents plans de dissociation possibles dans le zirconium : plan prismatique du réseau cristallin hexagonal compact (en orange) et plan basal (en vert). Énergies de faute d'empilement généralisées pour le plan (b) basal et (c) prismatique. Les différentes dissociations correspondant aux minima sont indiquées par les flèches bleues.

instable : les deux dislocations partielles se recombinaient alors pour permettre ensuite à la dislocation de s'étaler dans le plan prismatique.

La barrière de Peierls calculée en *ab initio* [16] pour cette même dislocation vis glissant dans un plan prismatique montre que cette barrière est très faible. La contrainte de

Peierls correspondante est également faible, au maximum 17 MPa, ce qui n'est pas très différent de la contrainte attendue pour les dislocations coins. Les calculs *ab initio* montrent donc que les dislocations vis dans le zirconium pur glissent facilement dans les plans prismatiques. Cela est en accord avec les observations expérimentales qui montrent que le glissement des dislocations dans le zirconium est athermal avec

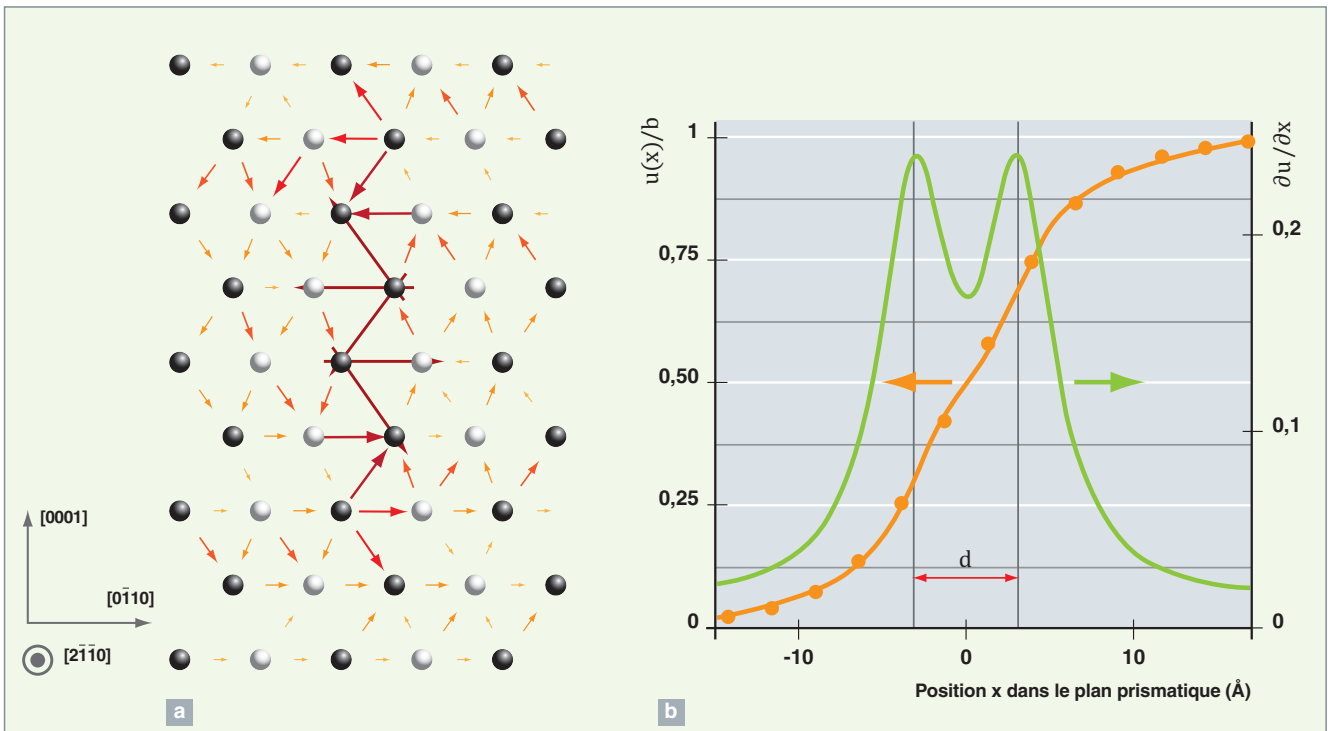


Fig. 156. a) Structure de cœur d'une dislocation vis dans le zirconium obtenue en *ab initio* : la carte de déplacements différentiels [15] montre l'étalement de la dislocation dans le plan prismatique ($0\bar{1}10$). b) Discontinuité de déplacement $u(x)$ et densité de dislocation $\rho(x) = \partial u / \partial x$ correspondantes faisant apparaître la distance de dissociation d .

une faible contrainte de Peierls, dès lors que la teneur en oxygène du zirconium est très faible (~100 ppm). En revanche, pour des teneurs en oxygène plus caractéristiques des alliages industriels de zirconium, les dislocations vis glissent difficilement et leur mouvement devient thermiquement activé. Les calculs *ab initio* devront donc s'attacher à présent à comprendre ce fort effet durcissant de l'impureté d'oxygène, durcissement qui semble lié à une modification par l'oxygène de la structure de cœur de la dislocation *via* une interaction électronique.

Lisa VENTELON, Emmanuel CLOUET,
Département des matériaux pour le nucléaire,
et David RODNEY,
Institut lumière matière, université Claude-Bernard Lyon I

► Références

- [1] L. VENTELON et F. WILLAIME, « Core structure and Peierls potential of screw dislocations in α -Fe from first principles: cluster versus dipole approaches », *J. Computer-Aided Mater. Des.*, **14** (2007), pp. 85-94.
- [2] L. DEZERARD, L. VENTELON, E. CLOUET, C. DENOVAL, D. RODNEY et F. WILLAIME, « *Ab initio* modeling of the two-dimensional energy landscape of screw dislocations in bcc transition metals », *Phys. Rev. B*, **89** (2014), pp. 024104-13.
- [3] D. R. TRINKLE et C. WOODWARD, « The chemistry of deformation: How solutes soften pure metals », *Science*, **310** (2005), pp. 1665-1667.
- [4] L. ROMANER, C. AMBROSCH-DRAXL et R. PIPPAN, « Effect of rhenium on the dislocation core structure in tungsten », *Phys. Rev. Lett.*, **104** (2010), pp. 195503-4.
- [5] L. ROMANER, V. I. RAZUMOVSKIY et R. PIPPAN, « Core polarity of screw dislocations in Fe-Co alloys », *Philos. Mag.*, **94** (2014), pp. 334-341.
- [6] E. CLOUET, L. VENTELON et F. WILLAIME, « Dislocation core energies and core fields from first principles », *Phys. Rev. Lett.*, **102** (2009), pp. 055502-4.
- [7] M.-C. MARINICA, L. VENTELON, M. R. GILBERT, L. PROVILLE, S. L. DUDAREV, J. MARIAN, G. BENCTEUX et F. WILLAIME, « Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislocations in tungsten », *J. Phys.: Condens. Matter*, **25** (2013), pp. 395502-15.
- [8] L. PROVILLE, D. RODNEY et M.C. MARINICA, « Quantum effect on thermally-activated glide of dislocations », *Nature Materials*, **11** (2012), pp. 845-849.
- [9] D. RODNEY et L. PROVILLE, « Stress-dependent Peierls potential: Influence on kink-pair activation », *Phys. Rev. B*, **79** (2009), pp. 094108-9.
- [10] L. VENTELON, F. WILLAIME et P. LEYRONNAS, « Atomistic simulation of single kinks of screw dislocations in α -Fe », *Journal of Nuclear Materials*, **386-388** (2009), pp. 26-29.
- [11] L. PROVILLE, L. VENTELON et D. RODNEY, « Prediction of the kink-pair formation enthalpy on screw dislocations in α -iron by a line tension model parametrized on empirical potentials and first-principles calculations », *Phys. Rev. B*, **87** (2013), pp. 144106-8.
- [12] B. LEGRAND, « Relations entre la structure électronique et la facilité de glissement dans les métaux hexagonaux compacts », *Philos. Mag.*, **49** (1984), pp. 171-184.
- [13] C. DOMAIN et A. LEGRIS, « Atomic scale simulation of the effect of hydrogen on dislocations in Zr », *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, **653** (2001), pp. Z3.8.
- [14] F. FERRER, A. BARBU, T. BRETBEAU, J. CREPIN, F. WILLAIME et D. CHARQUET, « The effect of small concentrations of sulfur on the plasticity of zirconium alloys at intermediate temperatures », *ASTM proc.*, **1423** (2002), pp. 863-885.
- [15] V. VITEK, « Theory of the core structures of dislocations in body-centred-cubic metals », *Crystal Lattice Defects*, **5** (1974), pp. 1-34.
- [16] E. CLOUET, « Screw dislocation in zirconium: An *ab initio* study », *Phys. Rev. B*, **86** (2012), p. 144104.

La modélisation de la mobilité des dislocations

La modélisation par **dynamique moléculaire*** (voir *supra*, pp. 25-28, le chapitre intitulé « L'approche multi-échelles de la modélisation des matériaux ») permet de nos jours de simuler les mouvements atomiques dans certains cristaux modèles contenant plusieurs millions d'atomes pendant des durées atteignant la micro-seconde. Ces capacités de calculs nous permettent d'examiner les processus élémentaires concernant le glissement des dislocations dans différents types de matériaux modèles. Les dislocations étant des défauts étendus, avec un champ de déformation élastique de type Coulombien, l'élaboration de simulations à l'échelle atomique nécessite une attention particulière portant sur la géométrie des cellules de simulation [1]. Outre ces aspects techniques, la principale limitation de ces calculs est imposée par la précision des potentiels interatomiques qui sont employés afin de décrire les forces entre atomes. Le développement de ces potentiels est en constante progression (voir *supra*, pp. 25-28, le chapitre intitulé « L'approche multi-échelles de la modélisation des matériaux »), les prédictions devenant de plus en plus précises sur le plan quantitatif. Le manque de précision de ces potentiels ne nous empêche toutefois pas d'étudier la mobilité des dislocations à l'échelle atomique. En effet, si nous ne pouvons pas considérer les données extraites directement des simulations à l'échelle atomique comme étant prédictives pour des matériaux réalistes, nous pouvons cependant utiliser ces simulations comme tests des modèles phénoménologiques qui déterminent les lois de mobilité des dislocations. Ces derniers sont construits suivant des principes de physique statistique et s'appuient sur une série d'approximations visant à s'affranchir de la complexité de l'échelle atomique. Afin de tester la validité de ces modèles et des approximations qui y sont liées, mais aussi afin d'améliorer la théorie, si cela est utile, il est tout particulièrement intéressant de les comparer aux simulations atomiques. Pour ce faire, deux étapes sont nécessaires. Une première étape consiste à déterminer les paramètres qui entrent dans les modèles de mobilité, à partir des simulations atomiques. Cela permet alors d'établir des prédictions sur la mobilité, à partir des modèles phénoménologiques pour un matériau modèle qui correspond aux simulations. La seconde étape consiste à réaliser des simulations du glissement des dislocations dans les conditions les plus réalistes qui soient et à mesurer directement les grandeurs prédites par les modèles statistiques. Les prédictions des modèles statistiques et les simulations atomiques peuvent alors être comparées. Ce travail a été réalisé pour le glissement des dislocations dans différentes situations d'intérêt pratique pour la métallurgie.

L'ancrage des dislocations

Afin d'élever la contrainte seuil de la déformation plastique et ainsi rendre les matériaux plus résistants, le glissement des dislocations peut être bloqué par des obstacles de différente nature, comme des précipités ou des impuretés. La méthodologie précédente a été appliquée au processus de franchissement des dislocations ancrée par des précipités pour le cas d'un alliage représentatif d'un alliage austénitique. Dans le cas de précipités fortement ancrants, le franchissement des dislocations opère *via* le contournement des obstacles (voir fig. 157). C'est le **mécanisme d'Orowan*** [2]. Le modèle phénoménologique généralement appliqué pour ce processus est celui de D.J. BACON, U.F. KOCKS and R.O. SCATTERGOOD (BKS) [3]. Un résultat typique de simulation du contournement d'Orowan est présenté dans la figure 157. Ces simulations ont été analysées en détail et des améliorations du modèle BKS ont été réalisées dans la ref. [2]. Il a été montré qu'il était nécessaire de tenir compte de la dissociation des dislocations, du fait de la faible énergie de faute d'empilement des cristaux de symétrie cubique à face centré (cfc). Ce phénomène général à tous les cristaux cfc se traduit par la formation de deux dislocations partielles séparées par un ruban de faute.

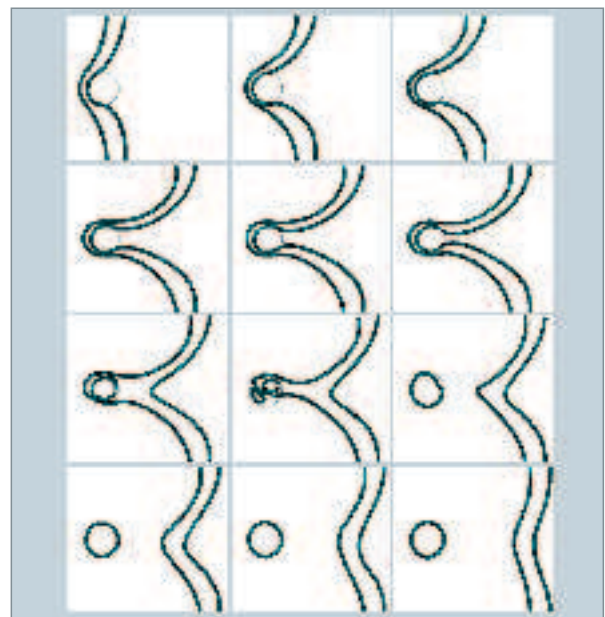


Fig. 157. Vue plane du contournement d'un précipité cohérent (cercle trait fin) de phase ordonnée par une dislocation (traits épais) dans un alliage de symétrie cubique à face centré de type Ni(Al). Voir réf. [2].

Le durcissement par effet de solution solide

Le **durcissement*** par effet de solution solide [4] est également un processus métallurgique très courant. Des modèles phénoménologiques [5] ont été proposés par différents auteurs tels que F. NABARRO [6] et J. FRIEDEL [7]. Ces modèles reposent sur l'approximation de la tension de ligne suivant laquelle la dislocation est considérée comme une simple ligne élastique. De plus, dans le cadre de ces modèles, cette ligne interagit uniquement avec un seul type d'obstacle. Le modèle de F. NABARRO est validé pour certains types d'alliages [6] et certaines améliorations sont proposées visant à prendre mieux en compte les détails atomistiques [4] comme l'augmentation de la dissociation des dislocations partielles avec la concentration atomique en soluté ou l'effet de l'énergie d'ordre dans les alliages ayant une tendance à l'ordre. Ces effets deviennent quantitativement notables pour des concentrations supérieures à environ 4 % atomiques.

L'activation thermique de la mobilité des dislocations

L'activation thermique de la mobilité des dislocations de type vis dans les métaux de symétrie cubique centrée, tels que le fer pur, est également revisitée. Les dislocations vis glissent suivant un processus dit « de Peierls », c'est-à-dire par activation thermique de double décrochement le long de la ligne de dislocation [8]. Il est possible de tenir compte de la nature quantique des cristaux dans la loi de mobilité. Les résultats (fig. 159) montrent un très bon accord avec les expériences [9]. En particulier, il apparaît que dans la limite des très basses températures, la prise en compte des effets quantiques [10] contribue notablement à la diminution de la contrainte maximale résolue, dite « contrainte de Peierls ». Dans ces calculs, avec différents matériaux modèles, cette diminution dépasse 0,4 GPa et est essentiellement liée à la nature quantique du cristal à basse température.

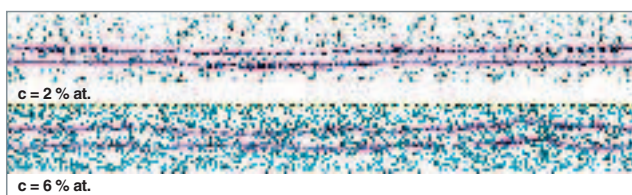


Fig. 158. Simulation atomistique de dislocations dissociées dans deux solutions solides de concentrations différentes. Les atomes de solutés sont représentés en gris et les atomes situés dans le cœur des dislocations partielles sont colorés en bleu [5].

Laurent PROVILLE,
Département des matériaux pour le nucléaire

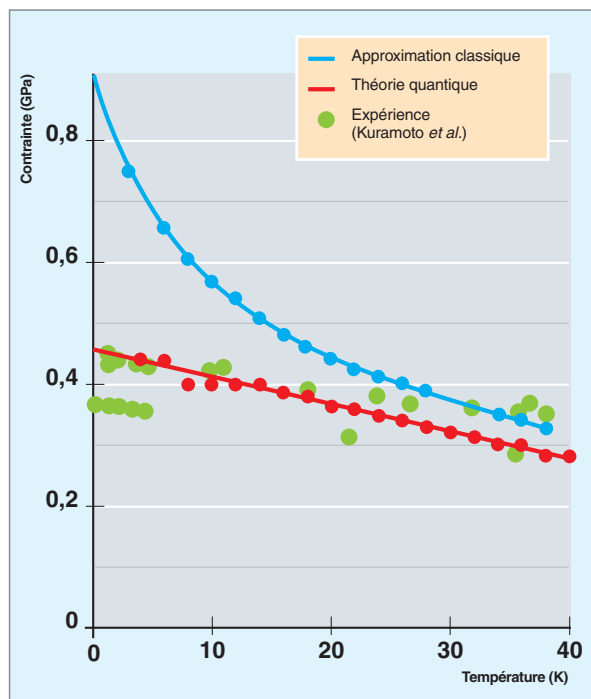


Fig. 159. Comparaison entre les expériences de traction sur monocristaux de fer (réalisées par E. KURAMOTO *et al.* [9]) et les prédictions théoriques établies à partir de simulation atomistiques de dislocations de type vis dans le fer. La prise en compte de la nature quantique des vibrations atomiques a permis d'obtenir un très bon accord [10].

► Références

- [1] D.J. BACON, Y.N. OSETSKY et D. RODNEY, « Dislocation-obstacle interactions at the atomic level », *Dislocations in Solids*, vol. 15 (eds Hirth, J.P. & Kubin, L.), pp. 1-90 (Elsevier, 2009).
- [2] L. PROVILLE et B. BAKO, *Acta Materialia*, **58** (2010), p. 5565.
- [3] D.J. BACON, U.F. KOCKS et R.O. SCATTERGOOD, *Philos Mag*, **28** (1973), p. 1241.
- [4] L. PROVILLE et S. PATINET, *Phys. Rev. B*, **82** (2010), p. 054115.
- [5] S. PATINET et L. PROVILLE, *Phys. Rev. B*, **78** (2008), p. 104109.
- [6] F. NABARRO, *Dislocations and Properties of Real Materials* (The Institute of Metals, London, 1985), p. 152.
- [7] J. FRIEDEL, *Dislocations* (Addison-Wesley, New York, 1964), p. 224.
- [8] D. RODNEY et L. PROVILLE, *Phys. Rev. B*, **79** (2009), p. 094108.
- [9] E. KURAMOTO, Y. AONO, K. KITAJIMA, K. MAEDA et S. TAKEUCHI, *Phil. Mag.*, **A 39** (1979), p. 717.
- [10] L. PROVILLE, M.-C. MARINICA et D. RODNEY, *Nat. Mater.*, **11** (2012), p. 845.

La fatigue des aciers austénitiques inoxydables

La fissuration par **fatigue thermique*** des circuits de refroidissement REP (aciers austénitiques de série 300) est à l'origine de nombreuses études dans le monde. Les approches utilisées sont avant tout expérimentales et mettent en évidence les particularités de la fatigue d'origine thermique, par rapport aux essais de fatigue uni-axiale isotherme classiques.

Il est difficile de corréler les phénomènes superficiels, potentiellement responsables de l'amorçage des fissures, aux mécanismes intra-granulaires sous-jacents. Cette difficulté peut être surmontée à l'aide de la modélisation numérique en

Dynamique des Dislocations* (DD), où le caractère tridimensionnel de la déformation plastique est explicitement pris en compte. Ainsi, la localisation de la déformation a pu être décrite en détail, à partir de la répartition des contraintes internes, associé à l'action du **glissement dévié*** [1]. La conclusion principale de ces analyses est que la déformation plastique cyclique permet, à elle seule, de fabriquer un relief superficiel comparable aux observations expérimentales (de type extrusion) et ce, même en l'absence de tout défaut superficiel initial [2]. Après validation (fig. 160), les simulations DD ont été appliquées à l'analyse de facteurs particuliers (voir ci-

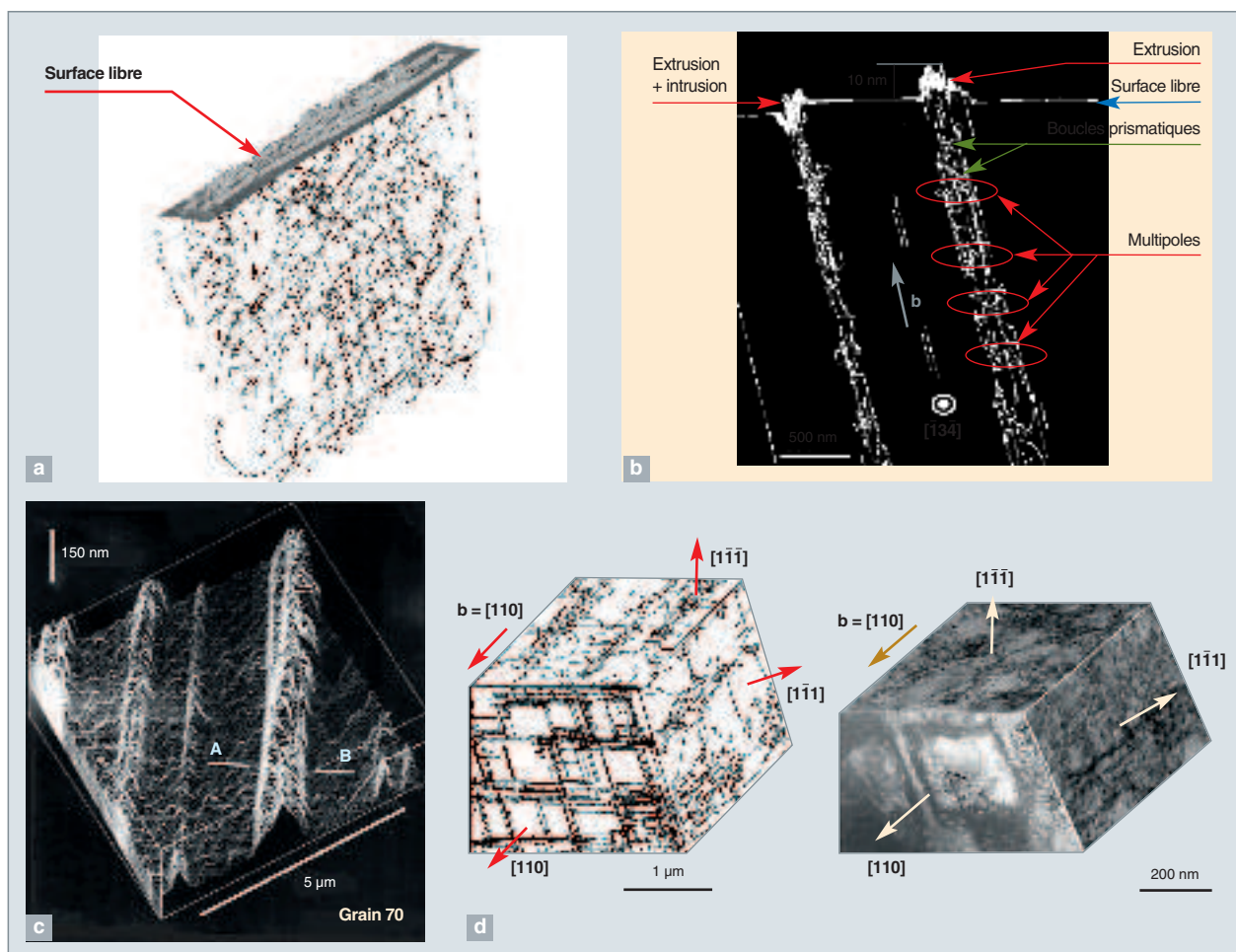


Fig. 160. Bande de glissement intense visualisée selon différentes directions : structures de dislocations et déplacements de surface correspondants pour un matériau avec un diamètre de grain de $5\ \mu\text{m}$ soumis à 23 cycles d'une déformation plastique de von Mises de $\Delta\varepsilon_p^{VM} = 10^{-3}$. a) Vue en perspective. b) Coupe parallèle au plan de glissement primaire. Simulation réalisée en glissement simple. c) Déplacements de surface associés aux bandes de glissement persistantes, observés par microscopie à force atomique. d) Microstructure de dislocations sous chargement équi-biaxial : simulations en dynamique des dislocations et observations au microscope électronique à transmission.

dessus), généralement associés à la fatigue thermique : le caractère bi-axial du chargement cyclique et l'existence d'une contrainte moyenne.

Les simulations permettent d'expliquer le phénomène de sélection des grains fissurés, par rapport à leur orientation cristallographique. Les simulations montrent également que les bandes de glissement et les microfissures associées impliquent au moins deux directions préférentielles (au lieu d'une

seule, en fatigue uni-axiale). Cette particularité est compatible, d'une part, avec le caractère sinueux des amorfes observées en fatigue thermique et, d'autre part, avec un franchissement accéléré des premières barrières microstructurales (joints de grains) et un amorçage plus rapide. En présence d'une contrainte moyenne, on observe un accroissement de l'irréversibilité plastique, affectant directement la croissance du relief superficiel, et donc, de la cinétique d'amorçage. Cet effet s'explique par une modification des structures de dislocations.

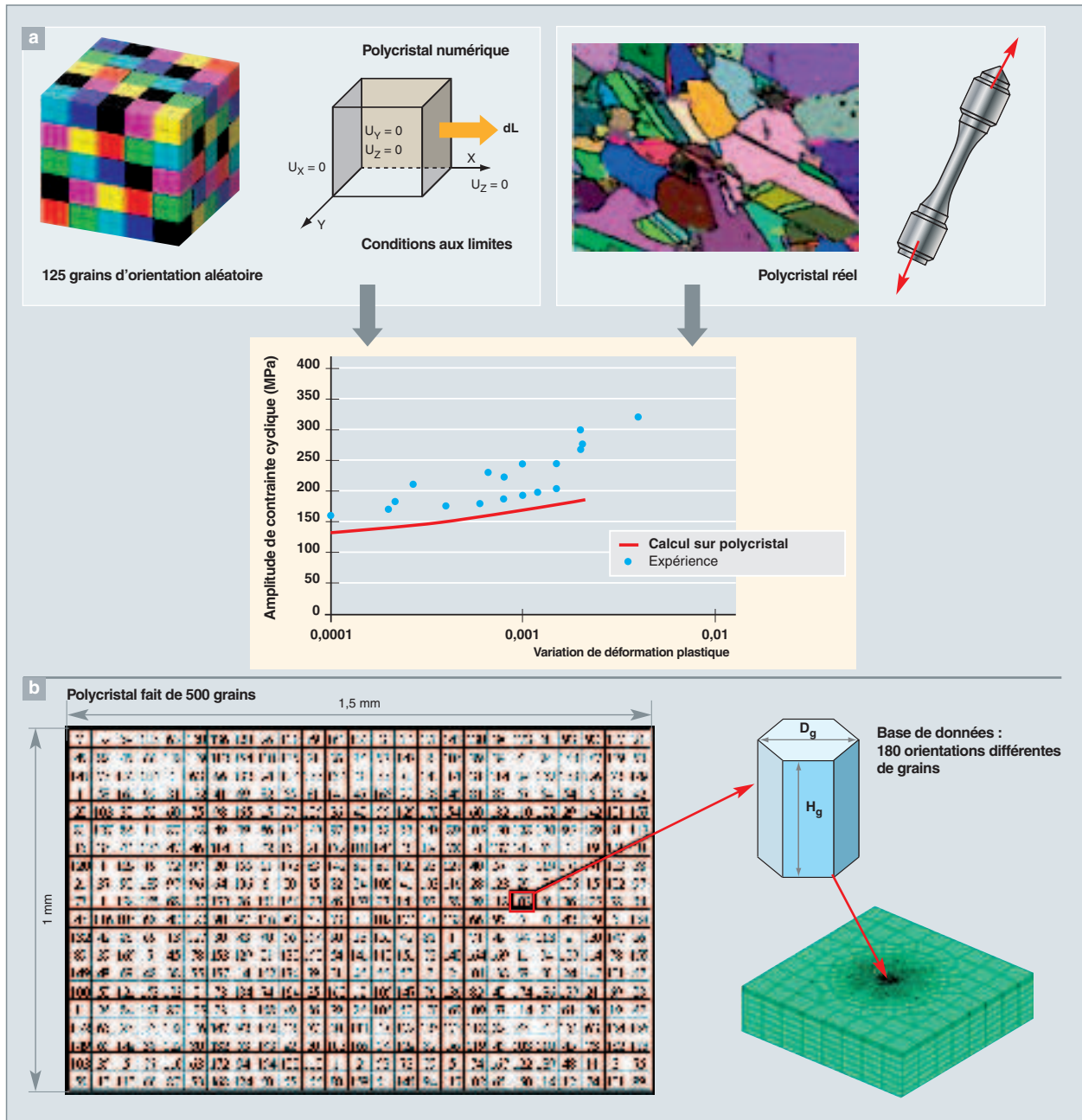


Fig. 161. Modélisation multi-échelles de la fissuration par fatigue d'un polycristal. a) Courbe de consolidation cyclique prédite par la modélisation comparée aux données expérimentales, obtenues dans différents aciers austénitiques. Le polycristal testé comporte 125 grains d'orientations distinctes. La loi de comportement des grains individuels est fondée sur des données de simulation en dynamique des dislocations. b) Le chargement $\Delta\varepsilon_{p,eq}$ au niveau de chaque grain est calculé en configuration de grain (bleu) noyé à la surface d'une matrice (verte). Chaque grain possède une orientation cristallographique particulière, choisie parmi 180 possibilités. La taille de grain est fixée à 50 μm .

Les simulations en dynamique des dislocations, adaptées à l'échelle du grain, ne permettent toutefois pas de prédire la durée de vie d'un polycristal sollicité en fatigue, ni la dispersion de la durée de vie, d'un polycristal à l'autre. La poursuite de cet objectif nécessite la prise en compte, le chaînage, de modèles décrivant des phénomènes propres aux échelles supérieures. L'hétérogénéité du champ de contrainte associé aux grains voisins, par exemple, nécessite la mise en œuvre de simulations à l'échelle de plusieurs grains. En utilisant des calculs par éléments finis, par exemple, les différents grains sont maillés explicitement et chaque grain possède un comportement mécanique associable à son orientation cristallographique.

La modélisation de l'endommagement d'un acier austénitique polycristallin

Ce modèle (ou chaînage), mis au point au CEA, comporte trois étapes principales. La première étape consiste à prédire l'amorçage de microfissures, à l'échelle des grains individuels. Cette prédiction est fondée sur la cinétique de croissance d'extrusions associées à un grain donné. Ces extrusions se présentent sous forme d'un excédent de matière sortant progressivement du matériau depuis sa surface libre. Du fait des concentrations de contraintes produites en surface, ces extrusions provoquent des initiations de fissures en surface, le long de leurs bords. Les valeurs du chargement de chaque grain sont estimées à l'aide de calculs par éléments finis 3D en configuration grain-matrice (fig. 161b), où la loi de comportement du grain central est déterminée à l'aide de simulations DD indépendantes [3] ou de résultats d'essais sur monocristaux [4, 5] (fig. 161a). La deuxième étape consiste à prédire la formation de fissures d'une taille supérieure à la taille des grains. Le franchissement des barrières microstructurales (joints de grains) est ici associé à la coalescence des microfissures, en fonction de différents angles critiques (dans l'espace 3D). Le modèle complet est ensuite testé sur un polycristal comportant 500 grains de surface, possédant une orientation cristallographique choisie parmi 180 possibilités. Les densités de fissures de taille critique (entre deux et quatre tailles de grains) associées à un chargement appliqué en tension-compression bi-axial sont comparables aux données expérimentales disponibles [3].

Une modélisation complète de la durée de vie d'un polycristal nécessite une troisième étape, décrivant la propagation des fissures de taille critique, jusqu'à la rupture finale. À cette échelle, les interactions inter-fissures sont prises en compte de manière explicite, *via* leur champ de contrainte à longue portée, décrit par la mécanique des milieux continus. Cette approche a été mise au point et validée par comparaison à des données de fatigue mécanique [6, 7].

Les études décrites dans cet article concernent un domaine de température restreint, où la déformation cyclique dépend principalement du phénomène de glissement. Or, un nombre croissant d'applications, notamment dans le secteur de l'énergie, nécessite une meilleure prédiction de la durée de vie à température élevée. À moyen et long terme, il sera nécessaire d'étendre le domaine d'application des modèles présentés, en y incorporant de nouveaux phénomènes physiques, propres aux conditions extrêmes (diffusion des défauts ponctuels [8], montée des dislocations)...

**Christian ROBERTSON, Maxime SAUZAY
et Ludovic VINCENT,**
Département des matériaux pour le nucléaire

► Références

- [1] C. DÉPRÉS, C.F. ROBERTSON et M.C. FIVEL, *Philosophical Magazine*, **84**, n° 22 (2004), pp. 2257-2275.
- [2] C. DÉPRÉS, C.F. ROBERTSON et M.C. FIVEL, *Philosophical Magazine*, **86**, n° 1 (2006), pp. 79-97.
- [3] S. OSTERSTOCK, C. ROBERTSON, M. SAUZAY, V. AUBIN et S. DEGALLAIX, *Materials Science and Engineering A*, **528** (2010), pp. 379-390.
- [4] A. STECKMEYER *et al.*, *Int. J. Fat.*, **40** (2012), pp. 154-167.
- [5] M. SAUZAY et L. KUBIN, *Prog. Mater. Sci.*, **56** (2011), pp. 725-784.
- [6] N. MALÉSYS, L. VINCENT et F. HILD, *International Journal of Fatigue*, **31** (2009), pp. 565-574.
- [7] J. RUPIL, L. VINCENT, F. HILD et S. ROUX, *Journal for Multiscale Computational Engineering*, **9**, n° 4 (2011), pp. 445-458.
- [8] J. POLAK et M. SAUZAY, *Mat. Sci. Eng. A*, **500** (2009), pp. 122-129.

Déformation et endommagement des aciers martensitiques revenus à haute température

La conception des réacteurs à neutrons rapides ou des centrales thermiques a motivé la tenue de nombreuses études sur le comportement des aciers **martensitiques*** revenus soumis à la **fatigue*** et/ou au **fluage*** à haute température (450-650 °C). Depuis les années 80, l'instabilité de leur microstructure dans certaines conditions de chargement (fatigue, fluage) a été mise en évidence dans la littérature [5] et [1]. Contrairement au cas général où la déformation des matériaux conduit à un écrouissage et à un durcissement, cette instabilité conduit ici à un **adoucissement*** qu'il convient de comprendre et de prédire. Une cavitation intergranulaire de fluage est aussi observée pour les plus longues durées de vie (100 kh à 600 °C) [6]. Il convient de comprendre et, prédire les mécanismes en jeu, afin de proposer des prédictions de vitesse de déformation et de durée de vie plus réaliste que les extrapolations des données de laboratoire obtenues le plus souvent pour des durées beaucoup plus courtes que les durées en service.

La microstructure initiale des aciers martensitiques revenus est caractérisée par la présence de nombreux sous-grains de taille de l'ordre de 0,5 μm le long des lattes martensitiques. La densité de dislocations est élevée ($\sim 10^{14} \text{ m}^{-2}$). Les dislocations sont plus nombreuses dans les joints faiblement désorientés qu'à l'intérieur des sous-grains. Les sous-grains sont, en général, de forme équiaxe et sont séparés par des joints faiblement désorientés (certains joints de lattes, joints transverses aux lattes). À une échelle supérieure (quelques microns), les blocs et les paquets sont fortement désorientés.

Cette microstructure initiale très dense explique l'adoucissement de cette classe de matériaux, observée durant les sollicitations de fatigue et/ou de fluage [8].

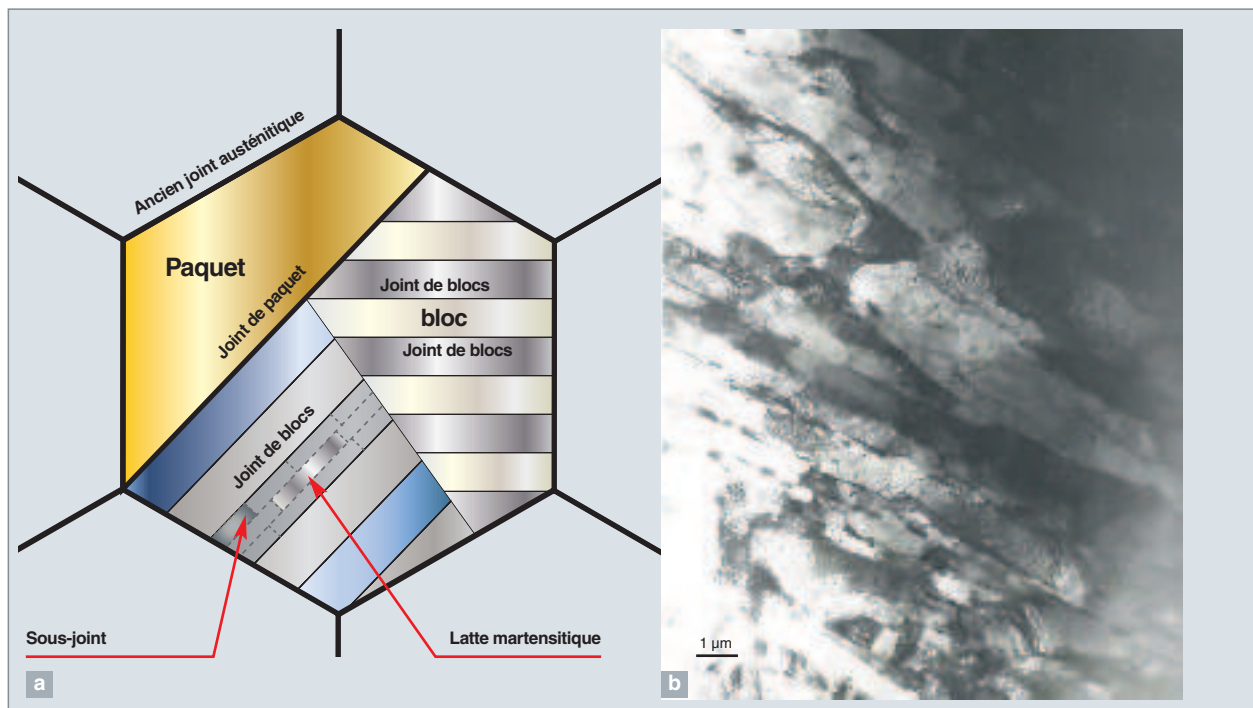


Fig. 162. a) Microstructure schématique d'un acier martensitique revenu. Les joints faiblement désorientés (angle de désorientation inférieur à 5°) sont dessinés en traits discontinus, alors que les autres joints sont représentés par des traits continus (joints de blocs, de paquets, anciens joints austénitiques). b) Microstructure initiale observée au microscope électronique à transmission.

La modélisation de l'adoucissement par réduction des sous-joints

Un modèle polycristallin à champ moyen a été proposé [4] et [8]. Il se fonde sur :

- Le modèle d'adoucissement : le nombre de sous-joints diminue selon l'activation des systèmes de glissement du bloc, ce qui entraîne un élargissement des distances d'ancrage des dislocations mobiles lié à la croissance de la taille de sous-grain. En effet, la densité de dislocations diminue à la suite des annihilations entre dislocations mobiles. La contrainte nécessaire au passage de la forêt de dislocations diminue donc également ;
- une loi de localisation bloc \rightarrow polycristal et une procédure d'homogénéisation : le code numérique SIDOLO est utilisé pour l'implantation de lois de viscoplasticité macroscopiques ou cristallines, ainsi que de modèles d'homogénéisation.

Le nombre de paramètres à identifier est faible : énergie et volume d'activation de la loi d'écoulement viscoplastique décrivant le glissement thermiquement activé assisté par la contrainte. Les distributions expérimentales de densité de dislocations et de taille de sous-grains sont utilisées comme données d'entrée. Les prédictions sont stables, par rapport aux paramètres matériau.

Un léger effet de vitesse de déformation sur l'adoucissement est prédit, en accord avec les résultats expérimentaux. La figure 163a met en évidence cet effet sur l'adoucissement macroscopique, *i.e.* la baisse continue de la contrainte en

cours d'essais cycliques à amplitude de déformation totale imposée. Les évolutions de contrainte sont correctement prédites. Les évolutions microstructurales en termes de croissance de la taille de sous-grain et de diminution de la densité de dislocations sont représentées sur les figures 163b et 164a. Les cinétiques d'évolution des tailles de sous-grain et densités de dislocations sont globalement en accord avec les mesures expérimentales sur essais interrompus, concernant quel que soit l'acier martensitique considéré comme par exemple l'acier grade 92 ou l'Eurofer 97, peu activable et étudié dans le cadre de la fusion [3].

Des cinétiques d'évolution ont été publiées concernant le fluage des aciers martensitiques revenus. Les mêmes mécanismes pourraient être à l'œuvre en fluage, avec toutefois un rôle accru de la diffusion de lacunes et de la montée des dislocations (accélération des mécanismes d'annihilation) ainsi que de la précipitation (modification des conditions d'épinglage des sous-joints, modification des effets de solution solide...). Des densités cumulées de désorientations entre sous-grains ont pu être mesurées au MEB-FEG-EBSD (microscopie électronique à balayage à émission de champ avec analyse par diffraction d'électrons rétrodiffusés) [9]. Des mesures ont aussi été effectuées pendant et après fluage (minimum de la vitesse et fin de vie). Les données initiales ont servi d'entrées du modèle d'annihilation de sous-joints, ce qui permet ensuite une comparaison entre histogrammes prédits et mesurés en cours d'essai de fluage. Les comparaisons effectuées pour un acier martensitique à 12 % de chrome sollicité à 650 °C montrent que les évolutions de désorientations prédites sont en accord raisonnable avec les mesures FEG-EBSD (fig. 164b).

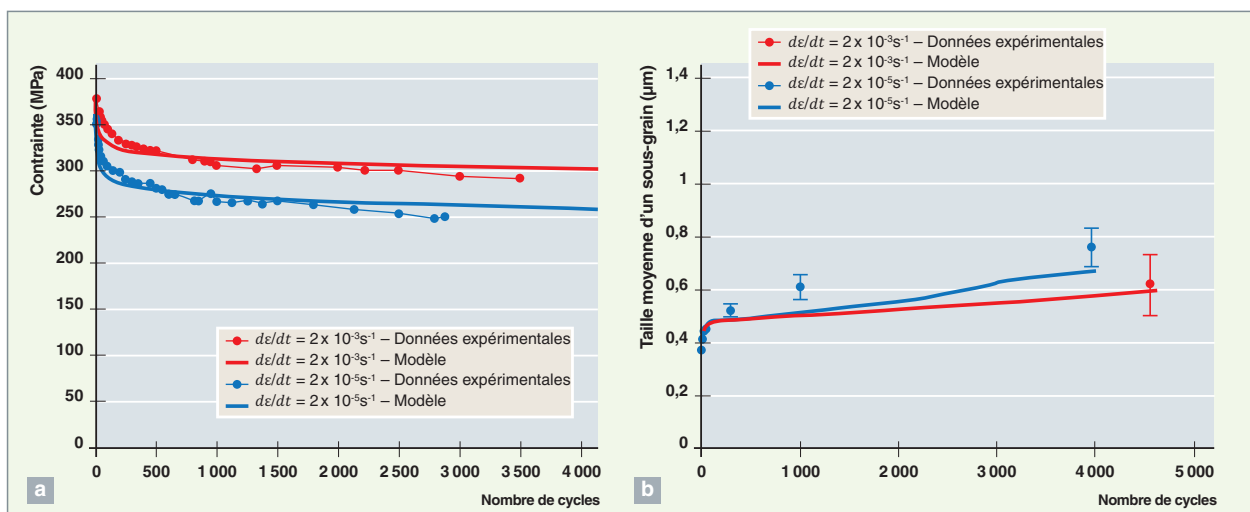


Fig. 163. Évolution (a) des amplitudes de contrainte prédites et mesurées ; (b) des tailles de sous-grain (acier grade 92, déformation cyclique : $\pm 0,35 \%$, vitesse de déformation : $2 \cdot 10^{-3}/\text{s}$ et $10^{-5}/\text{s}$, $T = 550 \text{ °C}$) [4].

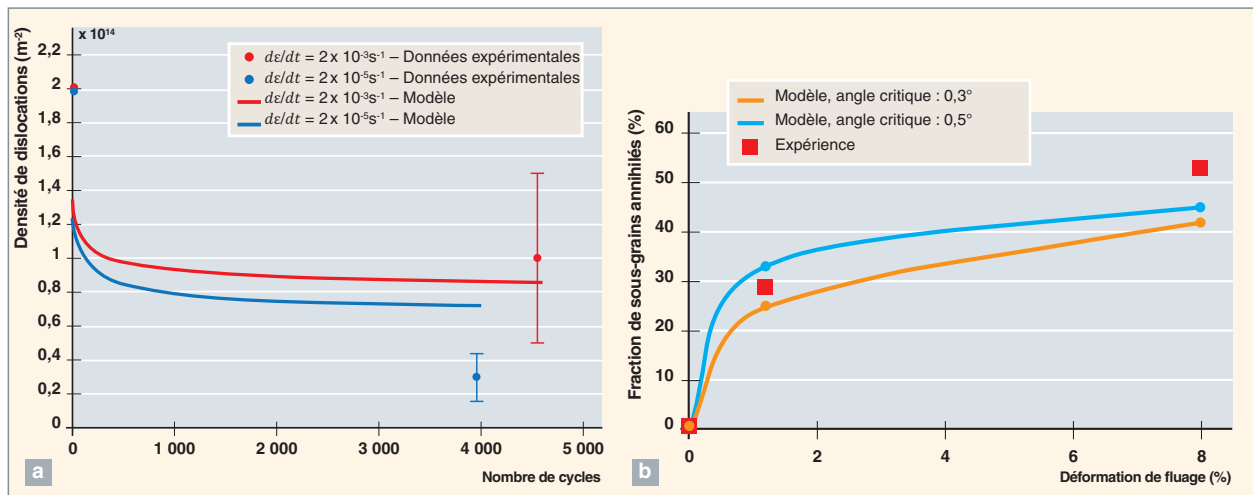


Fig. 164. Évolution (a) des densités de dislocations prédites et mesurées durant deux essais de déformation cyclique à vitesses différentes (acier grade 92, déformation cyclique : $\pm 0,35\%$; vitesse $2 \cdot 10^{-3}$ et $10^{-5}/s$, $T = 550^\circ C$) [4]; b) fraction de sous-grains annihilés pendant un essai de fluage [8]. Acier martensitique revenu à 12 % de Cr, soumis à une contrainte de fluage de 120 MPa à $650^\circ C$.

Endommagement et rupture en fluage

La localisation de la déformation dans une partie des éprouvettes d'essais ou **striction*** est un phénomène observé systématiquement lors de la caractérisation en fluage des aciers martensitiques et ce jusqu'à des durées de vie très longues (160 kh à $500^\circ C$ et 100 kh à $600^\circ C$) [8]. R. LIM *et al.* (2011) [6] ont simulé l'apparition puis l'évolution de la striction en cours de déformation de fluage en prenant en compte la vitesse de fluage minimum et l'adoucissement du matériau en fluage. Leurs prévisions de durée de vie sont en bon accord avec de nombreux résultats expérimentaux sur une large gamme de nuances de matériau, de contrainte et de tempé-

rature (figure 165a). Les évolutions en cours d'essai de section prédite et mesurée sont aussi en bon accord (figure 165b).

Les essais les plus longs menés à rupture permettent de conclure à une accélération des mécanismes d'endommagement, lors des essais long terme, en particulier à haute température. Ainsi, un essai à $600^\circ C$ toujours en cours et actuellement largement entré en stade tertiaire (ou accéléré) devrait se terminer après un temps à rupture de l'ordre de 250 000 h-350 000 h, inférieur d'un facteur 4 environ à l'extrapolation effectuée à partir de la courbe temps à rupture – contrainte obtenue à $600^\circ C$ pour des durées de vie inférieures à 100 000 h. À $650^\circ C$, l'extrapolation du régime forte contrainte conduit à une large surestimation de la durée de vie dès

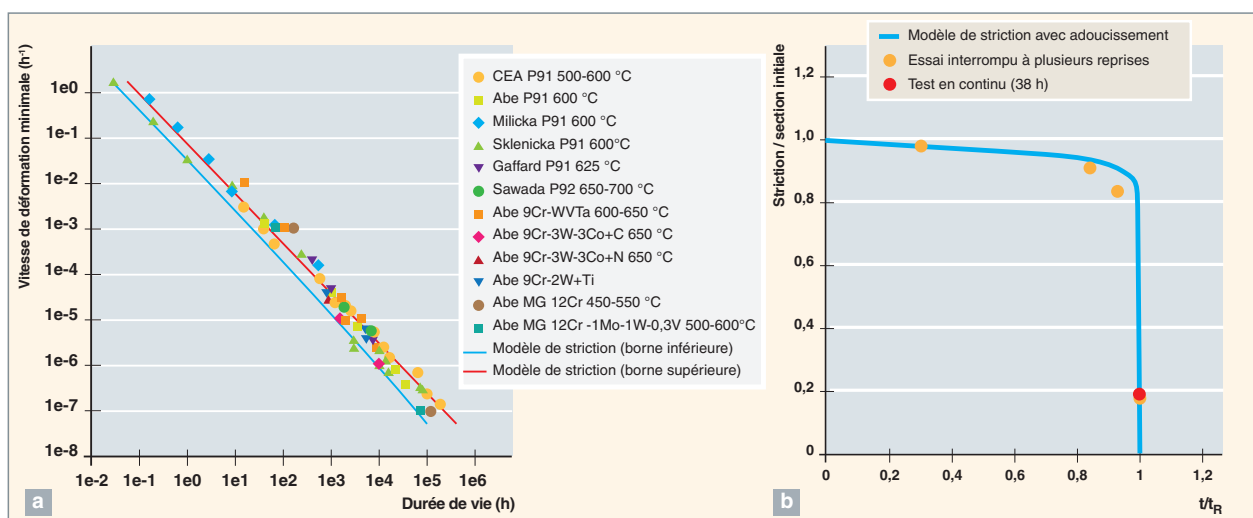


Fig. 165. Fluage et rupture. a) Durées de vie en fluage, mesurées expérimentalement sur des nuances et à des températures variées. Comparaison avec les prédictions du modèle de striction (bornes inférieures et supérieures). Gamme de température : $500-700^\circ C$; b) Comparaison entre les sections mesurées et prédites, lors d'un essai interrompu à plusieurs reprises, sur acier grade 91 (350 MPa, $550^\circ C$). Les temps de mesure et temps à rupture sont désignés respectivement par t et t_R .

20 000 h. Deux mécanismes peuvent expliquer cet effet long terme :

- La figure 166a met en évidence un régime de vitesse à basse contrainte qui, couplé avec la loi de MONKMAN-GRANT (vitesse de déformation minimale – temps à rupture) provoque une déviation par rapport à l'extrapolation linéaire dans le diagramme en contrainte. La prédiction de la striction présentée précédemment conserverait sa validité, mais elle serait accélérée dans le régime de vitesse anormalement élevé aux faibles contraintes appliquées. Pour une contrainte de 60 MPa, la vitesse de déformation stationnaire est supérieure d'un facteur 10 à l'extrapolation des données obtenues à forte contrainte. La prédiction obtenue est beaucoup plus proche de la valeur expérimentale, mais la surestime toutefois encore (fig. 166b) ;
- pour les longues durées de vie (de l'ordre de 100 000 h à 500-600 °C), des cavités de fluage intergranulaires se forment en cours d'essais. Elles ont pour effet de diminuer la ductilité du matériau. Les fractions de cavités intergranulaires correspondant aux essais rompus étant au plus de quelques 10^{-3} , elles affectent peu les vitesses de déformation comme le montre une approche de type endommagement continu.

La croissance de cavités intergranulaires par diffusion le long de joints généraux (blocs, paquets, anciens joints de grains austénitiques) a été simulée grâce au modèle classique de croissance sous germination continue. Ces joints, à la différence des joints spéciaux ne présentent pas de structure cristallographique simple, et sont des courts-circuits de diffusion bien connus. Le taux de germination a été identifié expérimentalement par comptage des cavités. Les évolutions des tailles moyennes de cavités sont qualitativement reproduites. Mais la taille moyenne est surévaluée, probablement car des joints orthogonaux à l'axe de traction sont considérés dans la modélisation. La durée de vie expérimentale de l'essai en cours semble bornée par les courbes simulées tenant compte de l'endommagement intergranulaire et du régime basse vitesse.

Aucun modèle ne permet actuellement de simuler la germination continue des cavités qui est un paramètre essentiel dans la prédiction de l'endommagement de fluage. Des calculs par éléments finis cristallins sur microstructures aléatoires ou réelles ont été menés [7] (voir *supra*, pp. 67-69, le chapitre intitulé « La production de microstructures de matériaux pour la simulation »). Elles mettent en évidence une variation notable des contraintes aux points triples, pouvant expliquer le caractère hétérogène et continu de la germination. Les travaux en court concernent d'une part la simulation et l'observation de la germination des cavités et d'autre part l'application des prédictions de durée de vie en fluage aux aciers austénitiques inoxydables. Les prédictions sont en accord avec les données à rupture du NIMS (Japon) pour différents alliages et pour des durées de vie atteignant 25 ans [2].

Maxime Sauzay,

Département des matériaux pour le nucléaire

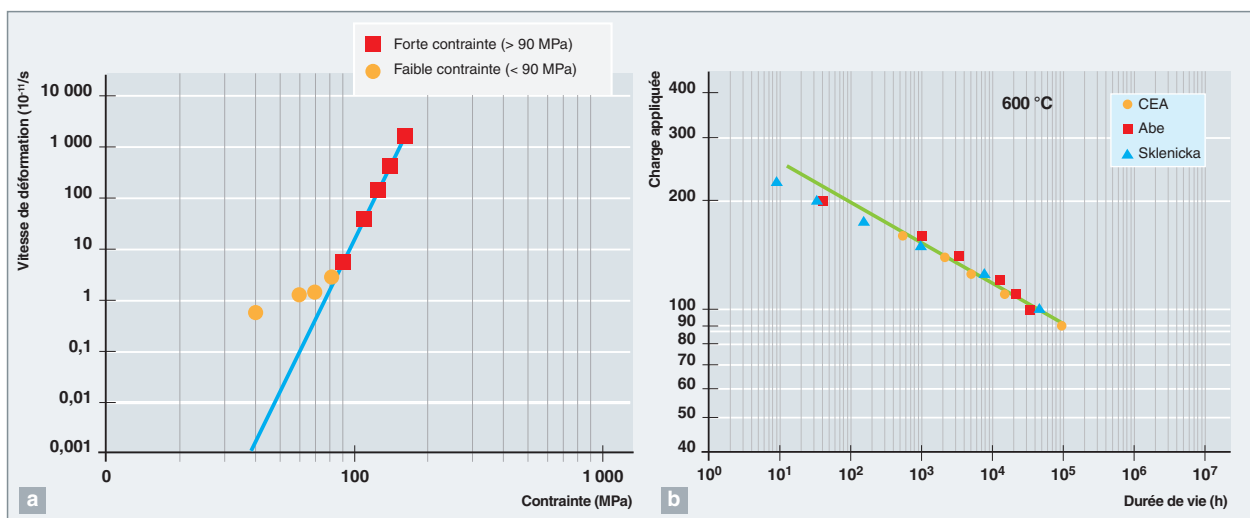


Fig. 166. Fluage d'un acier grade 91 à 600 °C : a) Régime de vitesse de déformation à haute contrainte (≥ 90 MPa) et basse contrainte (< 90 MPa). Extrapolation de la droite de Norton en-dessous du régime haute contrainte utilisé pour identifier ses paramètres [8]. b) Comparaison des durées de vie expérimentale et prédite grâce au modèle de striction, en prenant en compte le régime des faibles contraintes de la figure 166a [7].

► Références

- [1] G EGGELER, *Acta Metallurgica*, **37** (1989), p. 3225.
- [2] Y. CUI et M. SAUZAY, European Conference on Fracture, Trondheim, juillet 2014.
- [3] M. F. GIORDANA, P.-F. GIROUX, I. ALVAREZ-ARMAS, M. SAUZAY et A. ARMAS, « Micromechanical modelling of the cyclic softening of EUROFER 97 steel », *Mat. Sci. Eng. A*, **550** (2012), pp. 103-111.
- [4] P.-F. GIROUX, *Experimental study and simulation of the cyclic softening of tempered martensite ferritic steels*. Thèse de l'École des Mines / CEA Saclay (2011).
- [5] S. KIM et J. R. WEERTMAN, *Metallurgical Transactions A*, **19** (1988), p. 999.
- [6] R. LIM, M. SAUZAY et A.-F. GOURGUES, « Modelling and experimental study of the tertiary creep stage of grade 91 steel », *International Journal of Fracture*, **169** (2011), pp. 213-228.
- [7] R. LIM, (2011), *Numerical and experimental study of creep of the grade 91 steel at high temperature*. Thèse de l'École des Mines / CEA Saclay, 2011.
- [8] M. SAUZAY, « Déformation et endommagement à haute température des aciers martensitiques revenus. Fatigue, fluage et fatigue-fluage », Chapitre des Techniques de l'Ingénieur, Éditions T.I., Paris, 2012.
- [9] K.-G. TAK, U. SCHULZ and G. EGGELER, *Material Science Engineering A* (2009), pp. 510-511.



Le comportement macroscopique des aciers, déduit de la plasticité cristalline

L'un des objectifs des simulations en mécanique des matériaux appliquées aux aciers constitutifs des cuves des REP actuels est de garantir l'intégrité des cuves, lorsqu'elles sont soumises à des chargements représentatifs de scénarios accidentels (concept de prévention de la rupture brutale). La modélisation des phénomènes de rupture et d'endommagement fait l'objet d'un chapitre spécifique (voir *infra*, pp. 185-188, le chapitre intitulé « L'approche locale de la rupture fragile et de la rupture ductile des aciers »). Pour être efficace, cette modélisation doit s'appuyer sur une description du comportement mécanique du matériau (relation entre contrainte et déformation) aussi précise que possible. En particulier, on cherche à bien reproduire les effets de température et de **fluence*** neutronique sur le comportement macroscopique du matériau. Le durcissement d'irradiation ayant pour origine des mécanismes qui se situent à l'échelle atomique, une démarche multi-échelles est naturellement suivie, notamment au sein des projets européens *Perfect* [1] et *Perform60* [2].

Dans ce chapitre, nous nous concentrerons sur la dernière transition d'échelles de cette démarche, en l'occurrence le passage du grain à l'agrégat de grains représentatif du comportement macroscopique. Cette transition d'échelles s'appuie sur des lois de plasticité cristalline [3] (chapitre intitulé « La viscoplasticité cristalline », *supra*, pp. 71-74) et sur une méthode d'**homogénéisation*** numérique (chapitre intitulé « Les méthodes d'homogénéisation en mécanique des milieux continus », *supra*, pp. 75-80) détaillées plus spécifiquement ci-après.

La loi de plasticité cristalline

Une loi d'écoulement thermiquement activée [4] est retenue pour rendre compte de la moindre mobilité des dislocations vis observée, à mesure que la température diminue. La vitesse de déformation en cisaillement du système de glissement s s'écrit :

$$\dot{\gamma}^s = \dot{\gamma}_0 \exp \left\{ \frac{-\Delta G_0}{k_B T} \left(1 - \left(\frac{\tau_{eff}^s}{\tau_0} \right)^p \right)^q \right\} \text{sign}(\tau^s), \quad (1)$$

avec τ^s la **cisssion*** appliquée sur le système, k_B la constante de Boltzman et $\dot{\gamma}_0, \Delta G_0, \tau_0, p$ et q des paramètres dépendants

du matériau. La cisssion effective τ_{eff}^s s'exprime, quant à elle, par la relation suivante [5] :

$$\tau_{eff}^s = |\tau^s| - \tau_F - \frac{(\mu b)^2 \sum_u a^{su} \rho^u}{|\tau^s| - \tau_F} \quad (2)$$

avec τ_F la friction d'alliage, μ le module de cisaillement du matériau, b la norme du vecteur de Burgers, a^{su} une matrice d'interaction entre systèmes de glissement ayant des densités de dislocations ρ^u . L'évolution de ces densités suit la loi générale proposée *supra*, p. 71, avec toutefois des paramètres fonctions de la température. La prise en compte du durcissement d'irradiation peut se faire très simplement en modifiant la friction d'alliage τ_F ou encore en ajoutant un terme d'écrouissage fonction du produit d'une densité de défauts d'irradiation, ρ_{irr}^s , par leur force d'obstacle, a_{irr} .

L'ensemble des équations constitutives du modèle de plasticité cristalline est intégré dans le code de calcul aux éléments finis CAST3M, avec un formalisme de grandes déformations.

L'homogénéisation numérique du polycristal

Le comportement macroscopique du matériau polycristallin peut être décrit au moyen d'une méthode d'homogénéisation numérique (voir *supra*, pp. 75-79, le chapitre intitulé « Les méthodes d'homogénéisation en mécanique des milieux continus ») qui moyenne les résultats obtenus lors d'une simulation sur un agrégat de grande taille (fig. 167a) ou, à l'inverse, lors de multiples simulations sur des agrégats de petite taille (fig. 167b). Dans ce dernier cas, chaque agrégat n'est pas représentatif du comportement moyen du matériau, mais après un nombre suffisant de simulations (environ trente calculs sur des agrégats de trente grains), la moyenne du comportement macroscopique n'évolue plus.

La dépendance en température ou encore le durcissement d'irradiation peuvent être bien décrits par ce type d'approche comme en témoigne la figure suivante (fig. 168).

Outre le comportement macroscopique, cette méthode d'homogénéisation donne également accès au comportement moyen dans les grains d'orientation cristalline particulière, par rapport à l'axe de traction (fig. 169). Ce comportement peut être comparé à des résultats expérimentaux obtenus par dif-

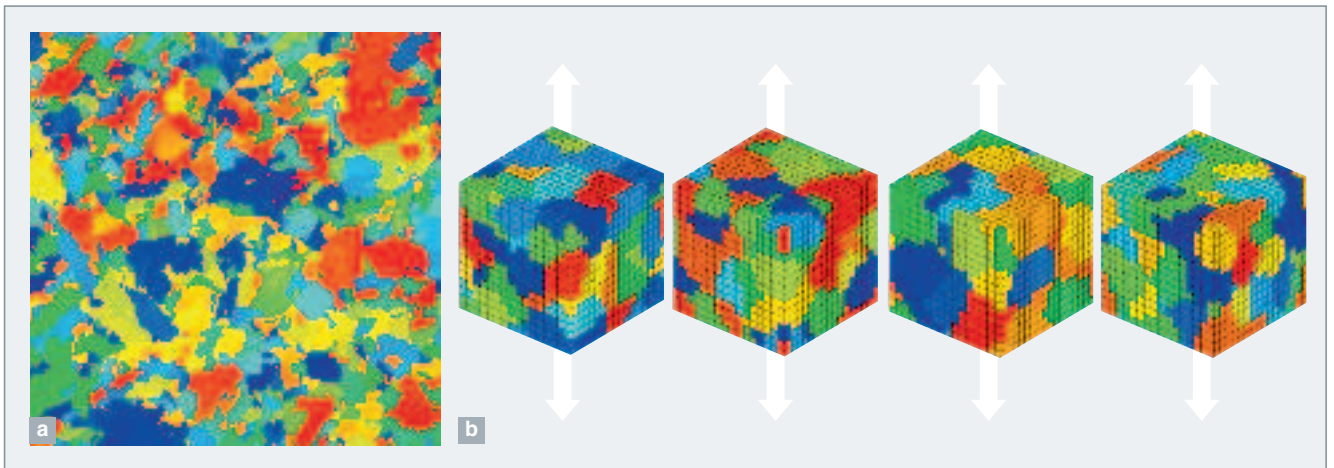


Fig. 167. Exemples de microstructures utilisées pour l'homogénéisation du comportement d'aciers de cuve. a) Microstructure réelle (2D, 200 μm x 200 μm) issue d'une cartographie EBSD. b) Microstructures virtuelles obtenues par tirages multiples. Chaque couleur représente une orientation cristalline différente.

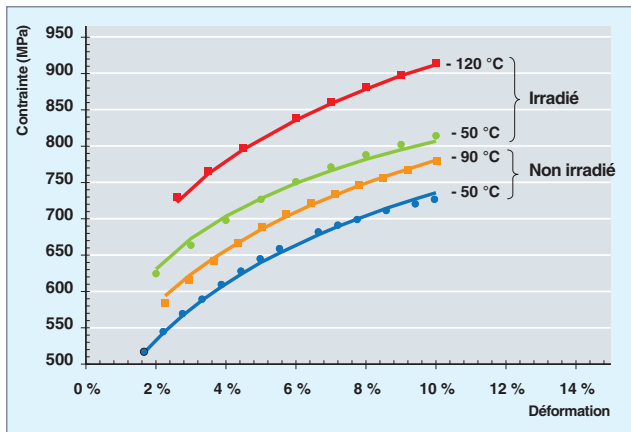


Fig. 168. Courbes de comportement macroscopique d'un acier de cuve. Symboles : résultats expérimentaux. Lignes continues : Simulation sur agrégat.

fractions de neutrons [6] et l'on constate alors un bon accord qualitatif entre simulations et expérience, ce qui constitue une forme de validation de l'approche (bonne description de champs locaux et de comportement moyen homogénéisé).

Cette approche du polycristal donne enfin accès à une distribution de contraintes moyennes par grain (au sens spatial) et cette information peut être utilisée pour enrichir un modèle d'approche locale de la rupture (voir *infra*, pp. 185-188, le chapitre intitulé « L'approche locale de la rupture fragile et de la rupture ductile des aciers »).

Ludovic VINCENT, Bernard MARINI et Lionel GÉLÉBART,
Département des matériaux pour le nucléaire

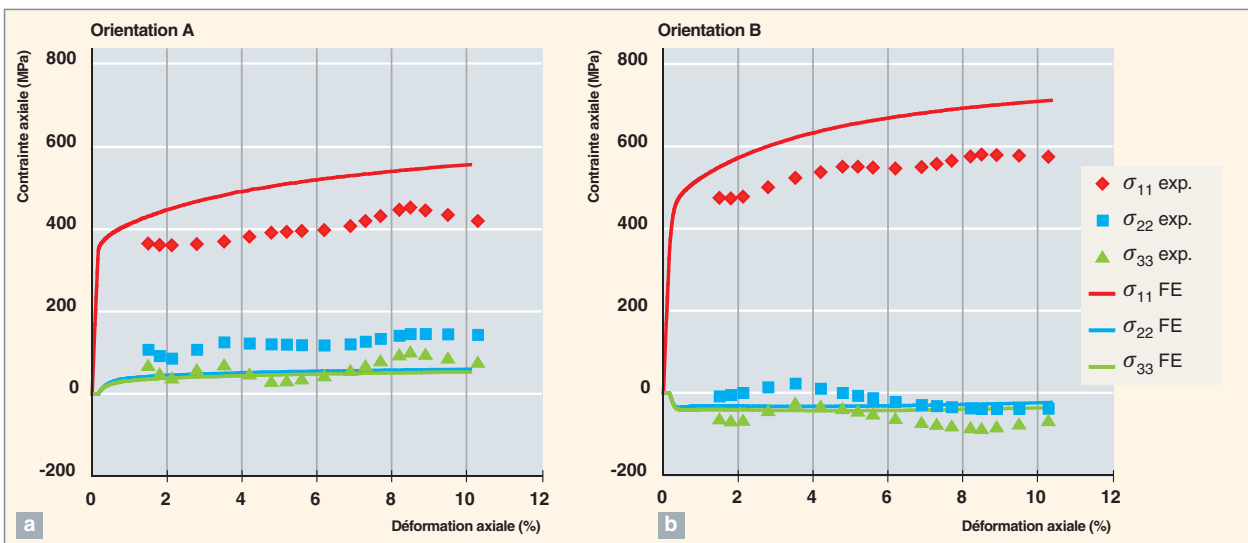


Fig. 169. Exemples de comparaison de résultats numériques (calcul par éléments finis) et expérimentaux sur le comportement moyen de grains d'orientation particulière par rapport à la direction de traction (A : $\{-100\}\langle 001\rangle$, B : $\{110\}\langle -1-11\rangle$) [7].

► Références

- [1] J.-P. MASSOUD, S. BUGAT, B. MARINI, D. LIDBURY et S. V. DYCK, « PERFECT – Prediction of Irradiation Damage Effects on Reactor Components: A summary », *Journal of Nuclear Materials*, **406** (2010), pp. 2-6.
- [2] S. LECLERCQ, D. LIDBURY, S. V. DYCK, D. MOINEREAU, A. ALAMO et A. A. MAZOUZI, « PERFORM 60 – Prediction of the effects of radiation for reactor pressure vessel and in-core materials using multi-scale modelling – 60 years foreseen plant lifetime », *Journal of Nuclear Materials*, **406** (2010), pp. 193-203.
- [3] M. LIBERT, C. REY, L. VINCENT et B. MARINI, « Temperature dependant polycrystal model application to bainitic steel behavior under tri-axial loading in the ductile-brittle transition », *International Journal of Solids and Structures*, **48** (2011), pp. 2196-2208.
- [4] U. F. KOCKS, A. S. ARGON et M. F. ASHBY, « Thermodynamics and Kinetics of Slip », *Progress in Materials Science*, **19** (1975), pp. 1-281.
- [5] E. RAUCH, *Étude de l'écroissage des métaux, aspects microstructuraux et lois de comportement*, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1993.
- [6] R. DAKHLAOUI, V. KLOSEK, M. H. MATHON et B. MARINI, « Orientation stress field analysis in polycrystalline bcc steel using neutron diffraction », *Acta Materialia*, **58** (2010), pp. 499-509.
- [7] L. VINCENT, L. GÉLÉBART, R. DAKHLAOUI et B. MARINI, « Stress localization in BCC polycrystals and its implications on the probability of brittle fracture », *Materials Science and Engineering A*, **528** (2011), pp. 5861-5870.



L'approche locale de la rupture fragile et de la rupture ductile des aciers

L'approche locale de la rupture a été développée au début des années 80 par F. M. BEREMIN reprenant les contributions de représentants du Centre des Matériaux de l'ENSM, de Framatome et de l'Autorité de Sûreté [1]. L'objectif de ce développement était d'affiner les critères employés dans les analyses de sûreté des installations nucléaires, en particulier dans les cas des ruptures par **clivage*** et **ductile*** de l'acier de cuve des réacteurs à eau. Le CEA a très rapidement utilisé cette approche et contribué à son développement. La première application a été la rationalisation des effets de taille des éprouvettes, de température d'essai et d'irradiation neutronique sur la rupture fragile d'un acier de cuve irradié [2]. Par la suite, le CEA a mis en œuvre, de façon régulière, l'approche locale de la rupture pour répondre à différentes problématiques concernant, tout d'abord, l'acier de cuve REP, mais également d'autres matériaux de structure d'installations nucléaires. Nous pouvons citer, en particulier :

- La modélisation de la ténacité d'un acier de cuve REP en rupture fragile intergranulaire [3] ;
- la **transition fragile-ductile*** de l'acier de cuve REP non irradié [4] ;

- la prédiction de l'effet d'échelle en rupture ductile d'aciers C-Mn [5] ;
- la méthode de prévision de la ténacité des aciers de cuve à partir d'un nombre réduit d'éprouvette **Charpy*** [6] ;
- la prédiction de la dispersion de ductilité des aciers **austéno-ferritiques*** vieillies [7] ;
- la modélisation de la déchirure ductile durant l'essai de **résilience*** [8] ;
- la validation numérique de la courbe maîtresse de ténacité dite « *Fracture Toughness Master Curve* » [9] ;
- l'influence de l'hélium sur la rupture fragile des aciers 9Cr (fig.170) [10].

Depuis 2008, les deux faits marquants concernant l'approche locale de la rupture ont été l'application au cas du préchargement à chaud et le développement d'un nouveau modèle utilisant les résultats des simulations d'agrégats polycristallins. Une synthèse de ces deux axes d'étude est présentée dans les pages suivantes.

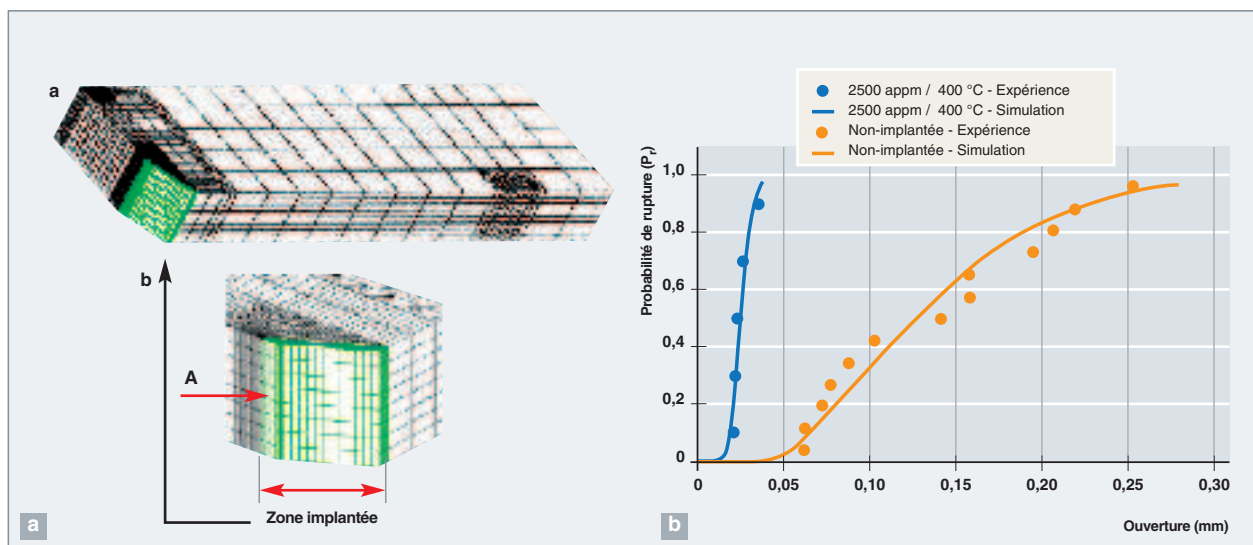


Fig. 170. a) Maillage, en vue d'une simulation par éléments finis (CAST3M) d'une éprouvette de flexion entaillée en acier 9Cr. La zone en vert de 100 µm d'épaisseur correspond à la zone implantée en He. b) Description des résultats expérimentaux à partir de l'approche locale de la rupture fragile (BEREMIN) avec et sans implantation d'He. Le caractère fragilisant de l'He est ainsi mis en évidence [10].

La simulation de l'effet de préchargement à chaud

L'effet de **préchargement à chaud*** ou effet WPS (*Warm Prestress Effect*) a été particulièrement étudié dans l'industrie électronucléaire [11], car il introduit la notion de ténacité effective qui dépend de l'histoire de chargement du matériau. Cet effet met en évidence deux caractéristiques : (a) un défaut de type fissure, qui a subi un chargement (KWPS) en traction à une température (T_1) à laquelle le clivage n'est pas actif, ne pourra se propager si le trajet de chargement qui lui est ensuite appliqué est décroissant (ou constant) pendant la phase de refroidissement, même si ce trajet croise la courbe de ténacité du matériau ; (b) la fissure rechargée à basse température (T_2 , avec $T_2 < T_1$) conduit à une ténacité supérieure à celle obtenue par un chargement monotone à cette température. Une application potentielle de ce concept est la vérification de l'intégrité de la cuve du réacteur, lors d'un accident de type APRP (Accident par Perte de Réfrigérant Primaire) durant lequel le chargement mécanique appliqué à la cuve varie pendant le transitoire thermique [12].

L'étude et la modélisation prédictive de l'effet WPS est particulièrement utile et intéressante, d'une part, car l'effet WPS est un cas de chargement où l'approche globale de la rupture conventionnelle ne peut s'appliquer, et, d'autre part, car les différents trajets de chargement doivent permettre de discriminer les mécanismes de rupture et de plasticité mis en jeu et donc les modélisations de la rupture fragile proposées. Nous nous sommes donc particulièrement intéressés aux trajets de chargement avec une variation de la charge pendant le transitoire thermique. Un trajet décroissant ou constant de la charge (sur figure 171a : trajet LUCF ou LCF) permettra d'éva-

luer l'effet d'un préchargement sur les mécanismes contrôlant le clivage (germination et/ou propagation des défauts microstructuraux) tel que décrit dans le modèle de S. R. BORDET [13], un trajet croissant de la charge (sur figure 171a : trajet LCIKF ou LCOIKF) permettra de discriminer si le déclenchement du clivage est lié à l'activation de la plasticité comme décrit dans le modèle de F. M. BEREMIN [1] et explicité dans [14].

Une modélisation prédictive de la ténacité après un préchargement à chaud doit donc s'appuyer sur des équations constitutives permettant de décrire les champs mécaniques locaux, et potentiellement leur distribution statistique (voir le paragraphe suivant), en pointe de fissure en fonction du trajet de chargement, et sur un modèle de la rupture fragile par clivage permettant de décrire les différentes étapes de la rupture par clivage [15]. Le modèle de S. R. BORDET a été implémenté dans CAST3M et les prédictions des fractiles de probabilité de la ténacité obtenues avec les deux modèles pour différents trajets de chargements ont été comparées dans [16] en utilisant une loi de comportement élastoviscoplastique paramétrée en température décrivant le comportement de l'acier de cuve 16MND5 [17].

Le résultat (fig. 171) montre que le modèle de S. R. BORDET, qui décrit de manière explicite l'influence de la plasticité sur la germination des microfissures et de leur émoussement potentiel, si le critère de propagation n'est pas respecté, est plus approprié pour prédire la rupture par clivage suivant un préchargement à chaud, notamment pour les trajets de chargement à pente croissante (LCIKF ou LCOIKF). Pour les cycles LCF et LCDKF, moins discriminants pour les mécanismes de rupture, les deux modèles donnent des prédictions sem-

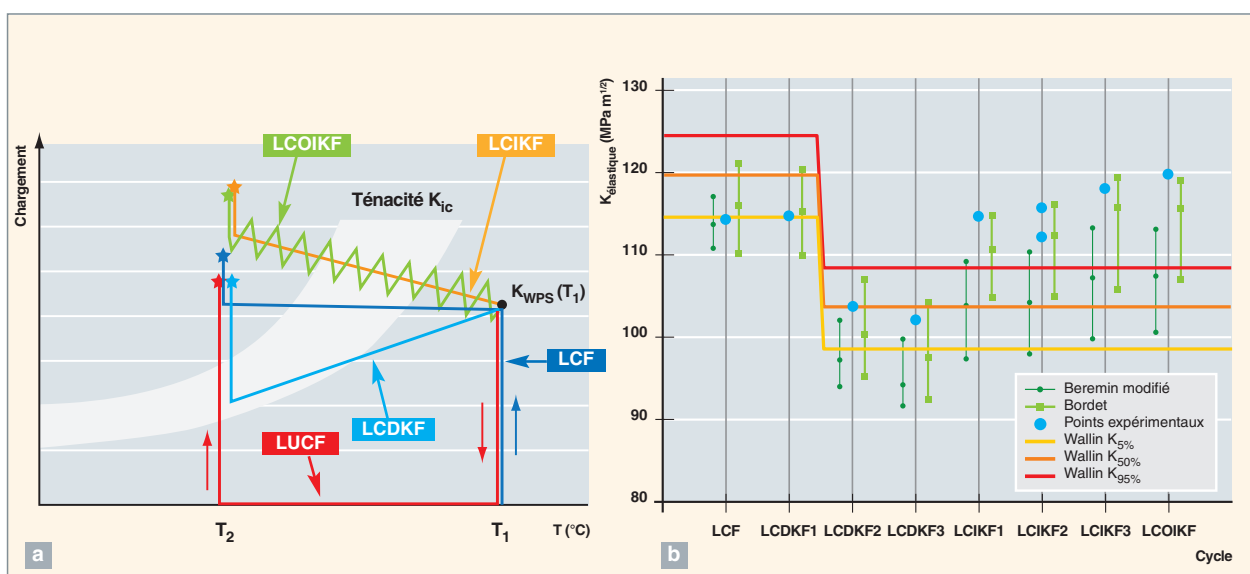


Fig. 171 Effet de préchargement à chaud : a) Trajets de chargement WPS étudiés, b) Comparaison des prédictions de la ténacité après WPS entre les modèles de F. M. BEREMIN et S. R. BORDET et les résultats expérimentaux.

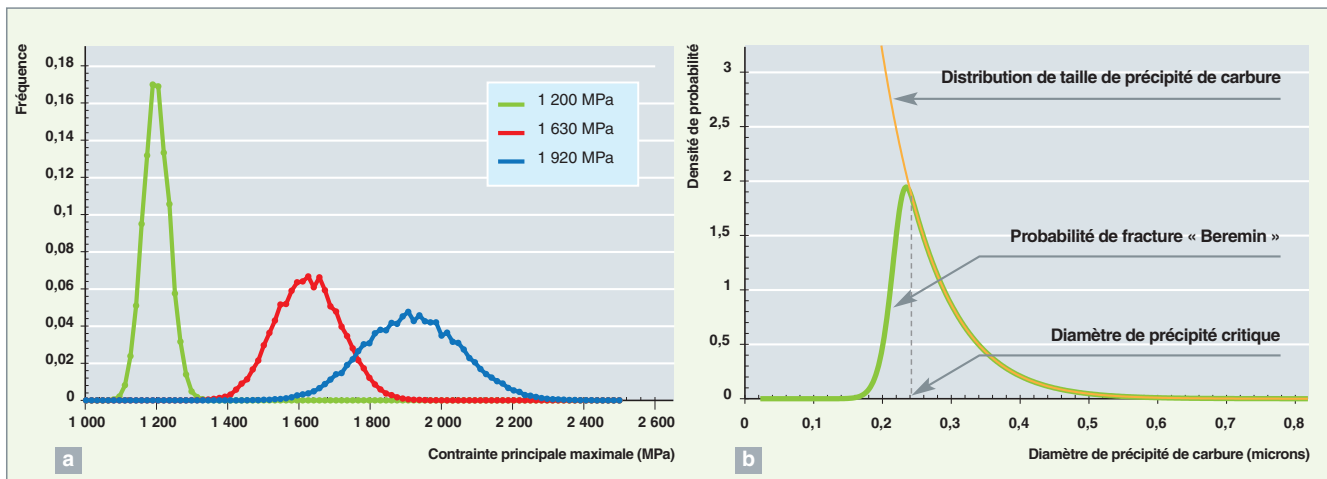


Fig. 172. a) Distribution des contraintes calculées pour trois niveaux de contrainte moyenne dans un agrégat construit à partir d'une cartographie de microscopie électronique par électrons rétrodiffusés (EBSD). b) Illustration de l'effet d'agrégat qui, en permettant le développement de contraintes supérieure à la moyenne, accroît la probabilité de rupture en rendant critique des précipités de carbure de taille plus petite que la taille critique de Griffith.

blables, en bon accord avec les données expérimentales. Une perspective intéressante à cette étude est l'évaluation de l'effet de préchargement à chaud sur la distribution statistique des grandeurs mécaniques locales qui contrôlent la rupture par clivage. L'intérêt majeur est d'évaluer numériquement si la modification de la distribution des valeurs de ténacité qui résulte d'un préchargement à chaud a pour origine une modification de la population de défauts ou une modification de la distribution des champs mécaniques qui contrôlent la germination et la propagation de ces défauts. Cette évaluation pourra être réalisée à partir des outils développés au CEA et présentée ci-après.

La modélisation de la rupture fragile, dans le cadre de la plasticité cristalline

La modélisation du comportement en plasticité cristalline permet de poser les fondements d'un modèle de rupture fragile de type approche locale tenant compte de l'effet de la microstructure (organisation des lattes et paquet de lattes) sur le comportement mécanique du matériau.

Ce modèle, dénommé MIBF (« *Microstructure Informed Brittle Fracture Model* ») [18], repose sur les hypothèses suivantes :

- Les contraintes et déformations sont distribuées à l'intérieur du volume élémentaire V_0 comme le montrent les calculs de plasticité cristalline et leurs distributions peuvent être décrites par une loi statistique analytique P (fig. 172a) ;
- à l'intérieur du volume élémentaire V_0 , il existe des sites d'initiation de rupture fragile de densité en nombre n_c , par exemple des carbures, distribués aléatoirement de façon

homogène et dont la distribution de taille r peut être décrite par une loi statistique analytique $F(r)$ (fig. 172b) ;

- chaque site potentiel d'initiation est susceptible de déclencher la rupture par clivage, lorsque la contrainte σ^* dépasse une valeur critique $\sigma_c(r)$ donnée par le **critère de Griffith***.

La probabilité de rupture du volume V_0 résulte alors de la convolution des deux distributions précédemment citées (figure 172b) :

$$P_f(V_0, \Sigma) = \int_0^{+\infty} \frac{dF(r)}{dr} P[\sigma^*(\Sigma(V_0)) > \sigma_c(r)] dr,$$

La rupture de l'éprouvette ou de la structure s'obtient alors par application de la théorie du maillon faible. Ce modèle, implémenté dans CAST3M, permet ainsi de prendre en compte les mécanismes physiques de la rupture liés à la microstructure métallurgique. Sous certaines conditions, il se réduit au modèle de F. M. BEREMIN et peut donc être considéré comme une extension de celui-ci. Mais par rapport au modèle de F. M. BEREMIN, il présente l'avantage de ne comporter qu'un paramètre ajustable, et il permet de décrire convenablement les effets de tailles d'éprouvette, de triaxialité, de température et d'irradiation (fig. 173). Le « modèle MIBF » est actuellement utilisé pour l'étude des faibles probabilités de rupture et également des effets de la température sur le déclenchement du clivage.

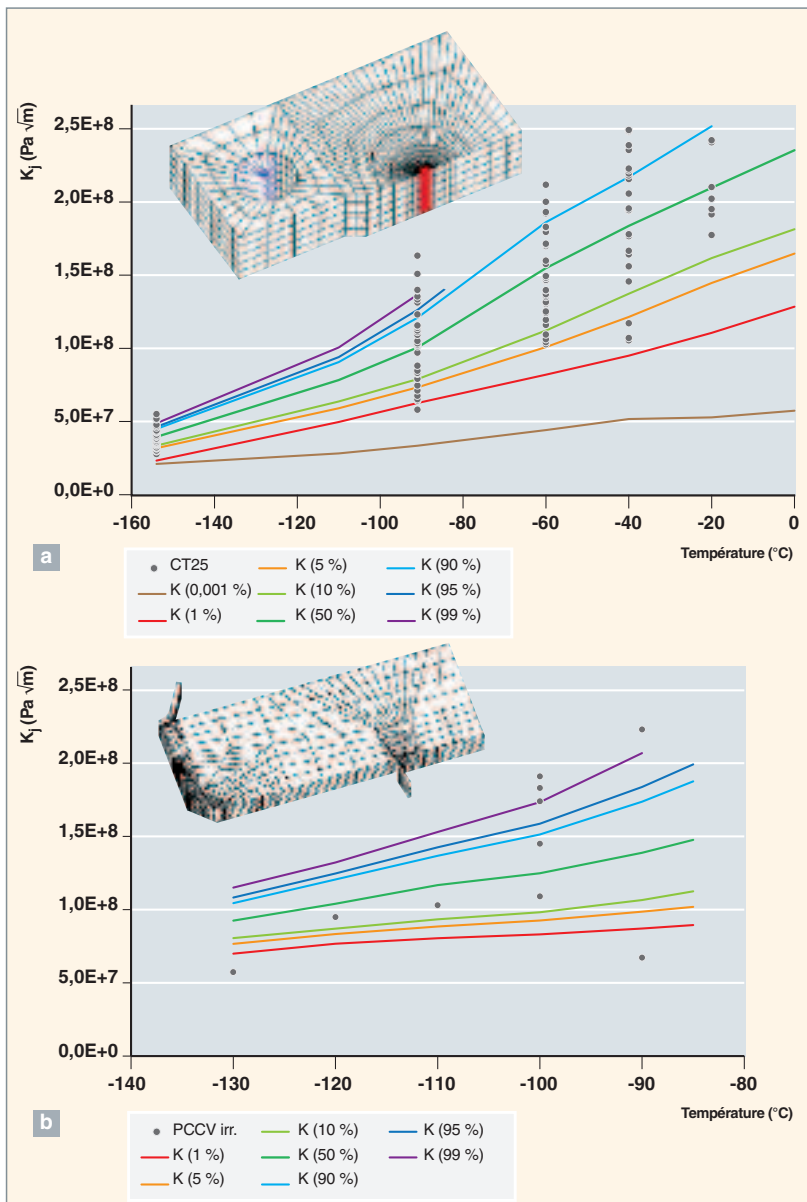


Fig. 173. Prévisions par le modèle MIBF de la rupture fragile d'éprouvettes CT25 non irradiées (a) et d'éprouvettes KCF irradiées (b).

Bernard MARINI, Pierre FORGET, Benoît TANGUY et Ludovic VINCENT,
Département des matériaux pour le nucléaire

► **Références**

[1] F.M. BEREMIN, *Met. Trans. A*, 14A (1983), pp. 2277-2287.
 [2] M. ALMUNDHERI, P. SOULAT et A. PINEAU, *Séminaire international sur l'approche locale de la rupture*, Moret-sur-Loing, 3-5 June 1986, pp. 243-256.
 [3] E. KANTIDIS, B. MARINI et A. PINEAU, *Fatigue and Fracture of Engineering Materials & Structures*, 17 (6): pp. 619-633, June 1994.

[4] S. RENEVEY, S. CARASSOU, B. MARINI, C. ERIPRET et A. PINEAU, *Journal de Physique*, IV 6 (C6), pp. 343-352, Oct. 1996.
 [5] S. CARASSOU, M. SOILLEUX et B. MARINI, *Journal de Physique*, IV 8 (P8), (nov. 1998), pp. 63-70.
 [6] P. FORGET, B. MARINI et N. VERDIÈRE, « Prediction of the brittle fracture toughness value of a RPV steel from the analysis of a limited set of Charpy results », *Proc. of Icone*, 9 (2001).
 [7] A. HAZARABEDIAN, P. FORGET et B. MARINI, *Material research*, 5, n° 2 (2002), pp. 131-135.
 [8] C. POUSSARD, C. SAINTE CATHERINE, P. FORGET et B. MARINI, *Journal of ASTM International*, 1, n° 1 (2004).
 [9] P. FORGET, B. MARINI, A. PARROT et P. TODESCHINI, *9th European Mechanics of Materials Conference – Local Approach to Fracture*, Moret-sur-Loing, 9-12 May 2006.
 [10] J. MALAPLATE, L. VINCENT, X. AVERTY, J. HENRY et B. MARINI, *Engineering Fracture Mechanics*, 75 (2008), pp. 3570-3580.
 [11] D. MOINEREAU, A. DAHL, S. CHAPULIOT, T. YURITZIN, P. GILLES et B. TANGUY, *7th International ASTMESIS Symposium on Fatigue and Fracture Mechanics*, Tampa, USA, November 14-16, 2007.
 [12] T. YURITZIN, L. FERRY, S. CHAPULIOT, P. MONGABURE, D. MOINEREAU, A. DAHL et P. GILLES, *Eng. Fract. Mech.*, 75 (2008), pp. 2191-2207.
 [13] S.R. BORDET, A.D. KARSTENSEN, D.M. KNOWLES, C.S. WIESNER, *Eng. Fract. Mech.* (2005), pp. 435-474.

[14] W. LEFEBVRE, G. BARBIER, R. MASSON, et G. ROUSSELIER, « A modified Beremin model to simulate the warm pre-stress effect », *Nucl. Eng. Design*, 216 (2002), pp. 27-42.

[15] S.R. BORDET, B. TANGUY, J. BESSON, S. BUGAT, D. Moineau et A. PINEAU, *Fatigue Fract. Engng. Mater. Struct.*, 29 (2006), pp. 799-816.
 [16] J. HURE et B. TANGUY, *20e Congrès français de Mécanique*, Besançon, 29 août au 2 septembre 2011.
 [17] B. TANGUY, Thèse de Doctorat, ENSMP, 2001.
 [18] L. VINCENT, L. GELEBART, R. DAKHLAOUI et B. MARINI, *Materials Science and Engineering*, A528 (2011), pp. 5861-5870.

Déformation et endommagement des aciers austénitiques irradiés

Les aciers inoxydables austénitiques sont largement employés dans les réacteurs à eau légère (REL) constituant la majorité du parc électro-nucléaire mondial où ils constituent notamment une partie des structures d'internes de cuve, mais sont aussi envisagées pour des systèmes futurs tels que RNR et ITER où ils seront potentiellement soumis à des conditions de fonctionnement plus sévères (température, flux, dose, pression). Dans les REL français, l'intégrité de ces structures est assurée par des contrôles périodiques. Parallèlement, une approche prédictive semi-empirique est développée à partir des études de compréhension et de modélisation menées à l'international et, notamment, au CEA.

Dans un environnement d'irradiation sous chargement les exposant à plusieurs dizaines de dpa (déplacement par atome) à des températures voisines de 350 °C, ces matériaux montrent une évolution de leur microstructure qui provoque une modification des propriétés mécaniques et l'apparition de nouveaux modes d'endommagement. Dès les faibles doses, les défauts d'irradiation (réseau de dislocations, **boucles de Frank***, cavités et éventuellement précipités en seconde phase) résultant de l'agglomération des **interstitiels***, de lignes de **dislocations***, de l'agglomération des **lacunes*** produisent un durcissement qui s'accompagne d'une diminution de la **ductilité***, d'une localisation de la déformation plastique et d'une perte de la **ténacité*** du matériau. Le durcissement et la perte de ductilité saturent au-delà de dix déplacements par atome (**dpa***) [1]. La germination et la croissance de cavités vides et de bulles d'hélium, dues majoritairement à la transmutation du Ni et du B, se traduisent par un **gonflement*** macroscopique observé aux fortes doses pour les réacteurs à neutrons rapides (RNR) et encore mal décrit pour les conditions REP (290 °C à 380 °C et flux de 10^{-7} - 10^{-8} dpa/s) faute de données expérimentales disponibles aux fortes doses (~80-100 dpa). Au-delà d'une certaine fluence, ces nuances, possédant initialement de bonnes propriétés de résistance à la corrosion, s'avèrent sensibles à la corrosion sous contrainte en milieu primaire nominal, on parle alors de corrosion sous contrainte assistée par l'irradiation ou **IASCC*** [2]. Ce mode d'endommagement résulte de la combinaison complexe de la ségrégation chimique aux joints de grains, du durcissement du matériau, et probablement de la modification des mécanismes de plasticité (localisation de la déformation plastique) [3] et des mécanismes d'oxydation [4]. L'évaluation de la durée de fonctionnement de ces structures, par exemple les vis de liaison en acier 316 écroui, nécessite, par ailleurs, une bonne connaissance du chargement appliqué, qui par un mécanisme

de *fluage sous irradiation*, conduit à une diminution des contraintes sur les vis dès les premiers dpa. Pour maîtriser l'intégrité des structures d'internes et pour pouvoir envisager une prolongation de leur durée de fonctionnement dans les meilleures conditions de sécurité, il est donc nécessaire de bien appréhender et modéliser les modes de déformation et d'endommagement de ces structures. Nous décrivons ci-dessous les études menées au CEA sur le fluage d'irradiation, la localisation de la plasticité et les effets potentiels du gonflement sur le comportement mécanique des aciers austénitiques inoxydables irradiés.

Le fluage d'irradiation

Sous contrainte, ces matériaux se déforment sous irradiation par **fluage d'irradiation***, alors que dans les mêmes conditions aucune déformation n'est observée hors irradiation. Contrairement aux évolutions des propriétés de traction, la déformation de fluage ne sature pas. Comparativement à la ductilité du matériau après irradiation, la ductilité sous irradiation est importante [5].

L'absence de gonflement dans une certaine gamme de température est confirmée par les observations au microscope électronique à transmission (MET), qui ne révèlent aucune cavité / bulle. Dans ce cas, la simulation de la croissance des boucles de Frank par dynamique d'amas (Code CRES-CENDO co-développé au CEA et à EDF) permet d'identifier les mécanismes qui sont à l'origine du durcissement et de l'augmentation de limite d'élasticité après irradiation [6,7]. Ces simulations ont également permis de quantifier le mécanisme de fluage d'irradiation par croissance anisotrope des boucles de Frank provoquée par la contrainte [8] (ou SIPA pour *Stress Induced Preferential Absorption of defects*). La simulation de l'anisotropie de croissance des boucles est en bon accord avec les observations au microscope électronique en transmission. Les déformations engendrées par ce mécanisme ne permettent cependant pas de rendre compte quantitativement des déformations expérimentalement mesurées. Le mécanisme de croissance anisotrope des boucles produit par la contrainte n'est donc pas le mécanisme principal. À partir de ces résultats, la prise en compte du mécanisme de montée des dislocations assisté par le glissement a été identifiée comme un axe à explorer. La poursuite de ces études s'appuiera sur l'inter-comparaison des observations au microscope électronique à transmission d'aciers inoxydables austé-

nitiques soumis *in situ* à une irradiation aux ions réalisées avec la plate-forme JANNUS du CEA, avec les prédictions de la microstructure d'irradiation obtenues à partir du code CRES-CENDO.

Étude de la localisation de la déformation et de ses conséquences sur la germination des fissures intergranulaires en corrosion sous contrainte assistée par irradiation (IASCC)

Le mode d'endommagement par IASCC résulte de la combinaison complexe et encore incomplètement appréhendée de la ségrégation chimique aux joints de grains provoquée par l'irradiation, du durcissement du matériau, et probablement des mécanismes d'oxydation et de la modification des mécanismes de plasticité, ces derniers ayant récemment été mis en avant comme ayant un rôle de premier ordre dans l'endommagement intergranulaire des aciers austénitiques irradiés et déformés en environnement inerte. Il est donc important d'évaluer quantitativement le chargement mécanique des joints de grains dû à la localisation de la plasticité.

Les aciers austénitiques inoxydables pré-irradiés soumis à un essai de déformation à vitesse imposée sont, dans certaines conditions expérimentales, le siège de localisation de la déformation sous forme de fines bandes claires dans lesquelles se concentre l'essentiel de la déformation plastique. D'après la littérature, cette forte localisation est à l'origine de l'apparition de microfissures intergranulaires dues à la modification des champs de contraintes aux joints de grains, et cela, quel que soit l'environnement (neutre, REP...). Une modélisation à l'échelle du grain permettant la prédiction de l'amorçage de ces microfissures a donc été proposée, via la méthode des éléments finis cristallins qui permet de prendre en compte les éléments microstructuraux nécessaires [3]. La modélisation proposée [8] est basée sur une description par l'élastoplasticité du comportement mécanique des bandes claires avec de faibles valeurs de contrainte critique et coefficient de durcissement, en accord avec les observations [9]. Le matériau du grain hors des bandes claires, ainsi que les grains voisins, obéissent à l'élasticité cubique, tandis que la matrice autour de l'agrégat de grains est élastique isotrope [9]. Des formules analytiques simples ont été déduites de très nombreux résultats de calculs par éléments finis basés sur des jeux de paramètres variables en termes d'épaisseur et longueur de bandes, coefficients des lois de comportement, modules élastiques, orientations des grains voisins. Le calcul des champs de contraintes normaux et tangentiels aux joints de grains montrent qu'ils présentent une singularité de type puissance, plus faible que la singularité prédite par le modèle de l'empilement des dislocations qui décrit la singularité de contraintes sur un joint de grains créé par cet empilement. Les nombreux résultats de calculs par éléments finis obtenus permettent de

donner une expression analytique des champs dépendant, notamment, de l'épaisseur de bande, t , et de la taille de grain, L . Les champs de contraintes prédits sont notablement plus faibles que ceux prédits par la théorie des empilements (fig. 174a). La prédiction de l'amorçage de microfissure se fonde alors sur le **critère de Griffith*** qui est basé sur la conservation de l'énergie. Il est alors possible de faire intervenir les énergies de surface et de joint de grains du matériau, affecté ou non par la corrosion [10, 11]. En se basant sur des valeurs expérimentales ou calculées *ab initio*, publiées dans la littérature, des prédictions de contrainte macroscopique à initiation de fissures fonction de l'environnement sont obtenues. Elles sont en meilleur accord avec les résultats expérimentaux que les prédictions des modèles d'empilement (fig. 174b) qui semblent bien surestimer les contraintes locales (fig. 174a). Le fluage sous irradiation produit une relaxation des contraintes intergranulaires, mais leur niveau peut demeurer élevé durant les quelques mois suivant une recharge, ce qui peut suffire à provoquer l'initiation de fissures intergranulaires de corrosion sous contrainte, d'après les essais en laboratoire.

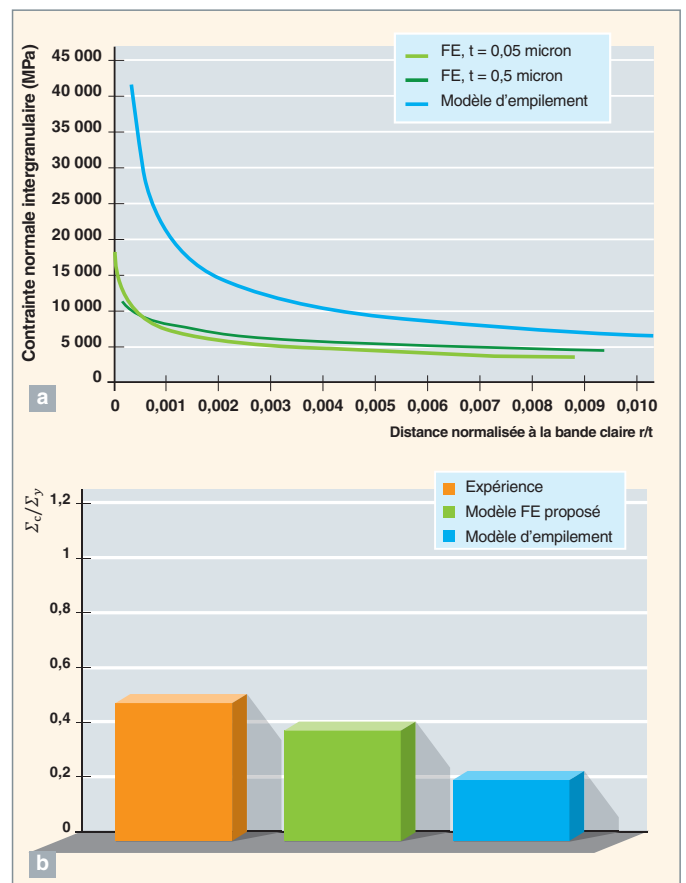


Fig. 174. a) Champs de contraintes intergranulaires prédits par le calcul par éléments finis et la théorie des empilements (de longueur une demi-taille de grains), en fonction de la distance à la bande claire, r ; b) Contraintes macroscopiques critiques mesurées ou prédites par le calcul par éléments finis et la théorie des empilements. Environnement inerte [12].

Cette approche sera généralisée à l'étude de l'interaction entre macles de déformation et joints de grains et prendra en compte la cinétique d'oxydation des joints de grains, grâce à la résolution de l'équation de la diffusion et l'utilisation de modèles de zones cohésives intergranulaires.

Dégradation des propriétés mécaniques des aciers austénitiques irradiés

La dégradation des propriétés mécaniques des matériaux CFC irradiés résulte de la formation des boucles de Frank (durcissement), et de la localisation de la déformation (adoucissement). La formation de cavités ou de pores et leur croissance, soit par l'irradiation (amas de lacunes dont le gonflement est la signature macroscopique), soit par la déformation plastique, va également participer à la dégradation.

il s'agit ici d'appréhender la modification sous irradiation des propriétés mécaniques, telle que la **ténacité***. La modélisation développée s'appuie sur le calcul d'agrégats cristallins (voir *supra*, pp. 71-74, le chapitre intitulé « La viscoplasticité cristalline ») et sur le formalisme en grandes transformations des lois cristallines à base de densité de dislocations et des défauts microstructuraux induits par l'irradiation pour décrire le durcissement dû à l'irradiation (voir *supra*, pp. 75-79, le chapitre intitulé « Les méthodes d'homogénéisation en mécanique des milieux continus »). Pour les aciers inoxydables austénitiques, il est considéré que le durcissement est principalement dû aux boucles de Frank, au moins pour les faibles doses [12]. Sous sollicitation et hors irradiation, l'évolution de la densité de dislocations est donnée par :

$$\dot{\rho}_D^s = \frac{1}{b_D} \left(\frac{1}{L^s} - g_c \rho_D^s \right) |\dot{\gamma}^s|,$$

$$\text{avec } L^s = \kappa \left(\sum_u^{12} b^{su} \rho_D^u + k_{al} \sum_p^4 \phi_L \rho_L^p \right)^{-\frac{1}{2}}$$

avec ρ_D^s la densité de dislocations du système s , L^s le libre parcours moyen des dislocations mobiles avant d'être immobilisées par les obstacles, g_c est le facteur de proportionnalité qui dépend du mécanisme d'annihilation des dipôles de dislocations, b_D la norme du vecteur de Burgers des dislocations de $\frac{1}{2} \alpha(110)$, b^{su} la matrice d'interaction entre dislocations, ϕ_L est le diamètre de boucles de Frank, p ($p = 1 \dots 4$) représente le numéro du plan de glissement, ρ_L^p est la densité de boucles de Frank sur le plan de glissement p et k_{al} le coefficient d'interaction effective entre dislocations et boucles de Frank.

L'interaction entre les dislocations mobiles et les boucles de Frank est décrite dans le libre parcours moyen L^s . $\dot{\gamma}^s$ est la vitesse de glissement.

L'adoucissement dû à la localisation de la déformation dans des bandes claires (voir paragraphe ci-dessus) est implicitement décrit dans l'évolution de la densité des boucles de Frank. L'observation expérimentale qui montre que seule une partie des boucles de Frank est balayée par la déformation plastique est introduite dans le modèle *via* un paramètre ρ_L^{sat} [12]. La capacité du modèle proposé à reproduire à la fois le comportement à l'état non irradié et irradié est montrée sur la figure 175a où le modèle est confronté aux résultats expérimentaux. Cette modélisation permet de mettre en évidence l'effet de structure (striction) sur la perte de ductilité observée à l'état irradié (fig. 175b) [12].

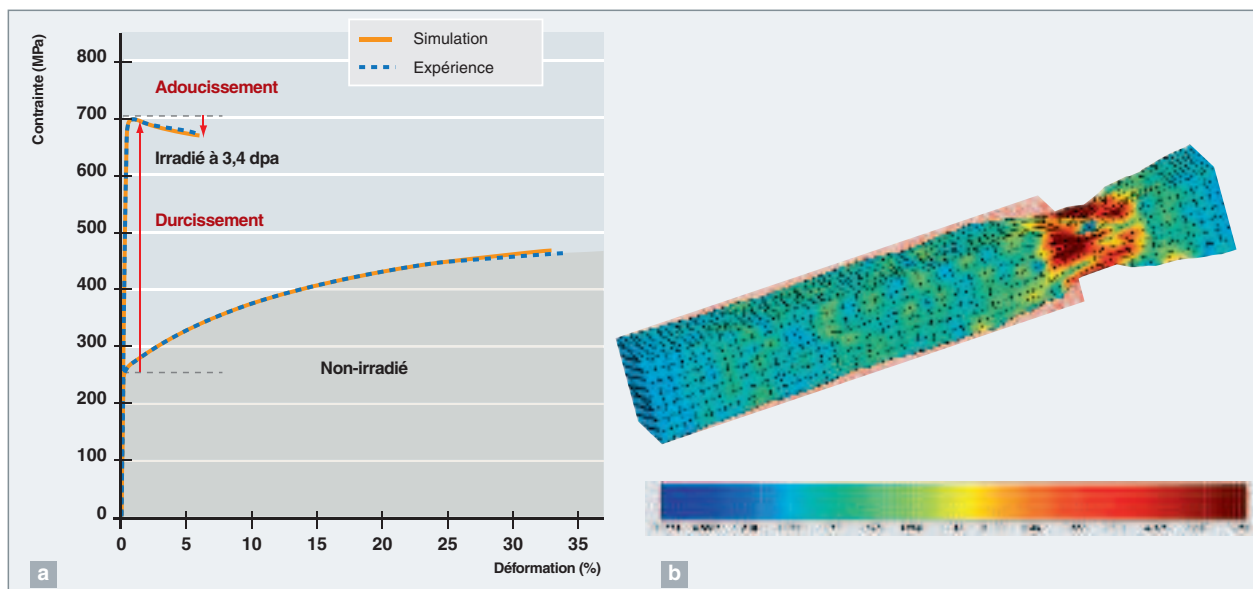


Fig. 175. Effet de l'irradiation d'un acier 304L sur son comportement mécanique :

- a) Confrontation du modèle de comportement aux résultats expérimentaux pour le matériau aux états non irradié et irradié.
- b) Simulation de la **striction***, à partir d'une poutre polycristalline contenant 1 715 grains cubiques aléatoires, état irradié à 3,4 dpa.

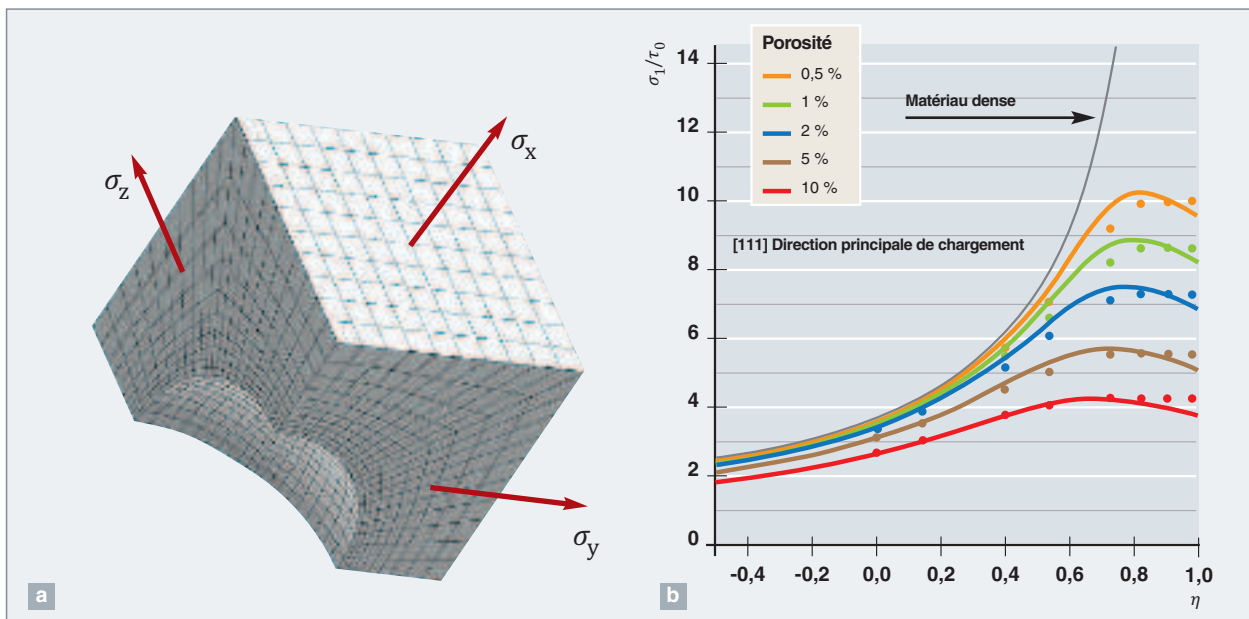


Fig. 176. a) Utilisation d'un agrégat cristallin avec une porosité sphérique pour déterminer les paramètres du critère de plasticité pour un monocristal poreux. b) Effet de la porosité entre 0,5 % et 10 % pour une direction de chargement [111] sur la surface de plasticité pour différentes triaxialités (représenté par paramètre η). σ_1/τ_0 représente la contrainte d'écoulement normalisée [13].

La prise en compte de la formation de pores à l'échelle cristalline est en développement au travers d'un critère de plasticité pour monocristal poreux couplé à une loi d'évolution de la porosité [13]. À partir de calculs d'agrégats cristallins avec une porosité sphérique (fig. 176a), les paramètres du critère de plasticité sont obtenus. On peut ainsi appréhender l'évolution de la porosité (et donc du pourcentage volumique de gonflement) sur le seuil plasticité du matériau (fig. 176b) pour différents niveaux de triaxialité.

Benoît TANGUY, Maxime SAUZAY, Jérôme GARNIER,
Département des matériaux pour le nucléaire

avec la participation de **Cédric POKOR,**
EDF R&D, EDF Les Renardières, Moret-sur-Loing, France

Jacques BESSON et Samuel FOREST,
Mines Paristech, Centre des matériaux Pierre-Marie Fourt, Evry, France

► Références

- [1] C. POKOR *et al.*, « Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part I: Evolution of the microstructure », *Journal of Nuclear Materials*, **326**, pp. 19-29.
- [2] D. FÉRON, E. HERMS and B. TANGUY, « Behavior of stainless steels in pressurized water reactor primary circuits », *Journal of Nuclear Materials*, (2012), <http://dx.doi.org/10.1016/j.jnucmat.2012.03.034>
- [3] M. SAUZAY, K. BAVARD and W. KARLSEN, « TEM observations and finite element modelling of channel deformation of pre-irradiated austenitic stainless steels. Interactions with free surfaces and grain boundaries », *Journal of Nuclear Materials*, **406** (2010), pp. 152-165.
- [4] B. MUZEAU, S. PERRIN, C. CORBEL, D. SIMON et D. FÉRON, *Journal of Nuclear Materials*, **419** (2010), pp. 241-247.
- [5] J. GARNIER *et al.*, « Irradiation creep of SA 304L and CW 316 stainless steels: Mechanical behaviour and microstructural aspects. Part I: Experimental results », *Journal of Nuclear Materials*, **413**, pp. 63-69.
- [6] C. POKOR *et al.*, « Irradiation damage in 304 and 316 stainless steels: experimental investigation and modeling. Part II: Irradiation induced hardening », *Journal of Nuclear Materials*, **326**, pp. 30-37.
- [7] J. GARNIER *et al.*, « Irradiation creep of SA 304L and CW 316 stainless steels: Mechanical behaviour and microstructural aspects. Part II: Numerical simulation and test of SIPA model », *Journal of Nuclear Materials*, **413**, pp. 70-75.
- [8] P. EVRARD and M. SAUZAY. Modelling of the effect of dislocation channel on intergranular microcrack nucleation in pre-irradiated austenitic stainless steels during low strain rate loading », *Journal of Nuclear Materials*, **405** (2010), pp. 84-93.
- [9] J.V. SHARP, *Philosophical Magazine*, **16** (1977), p. 77.
- [10] M. SAUZAY and K. VOR, « Influence of plastic slip localization on grain boundary stress fields and microcrack nucleation », *Eng. Fract. Mech.*, **110** (2013), pp. 330-349.
- [11] M. SAUZAY and M. OULD, « Moussan. Predictions of grain boundary stress fields and microcrack initiation induced by slip band impingement », *Int. J. Fract.*, **184** (2013), pp. 215-240.
- [12] H. XU, J. BESSON, S. FOREST and B. TANGUY, *A micromechanical modeling for irradiated austenitic stainless steels, IUTAM-AMMS 2012*, April 23th-27th, Paris. 2012.
- [13] H. XU, J. BESSON, S. FORES, B. TANGUY and S. BUGAT, « A yield function for single crystals containing voids », *Int. Journal of Solids and Structure*, **50** (2013), pp. 2215-2131.

La modélisation physique du comportement mécanique des alliages de zirconium, avant, après irradiation et en conditions accidentelles

Les alliages de zirconium sont utilisés depuis plus de trente ans dans l'industrie nucléaire comme matériau constituant les éléments de structure de l'assemblage combustible des Réacteurs à Eau sous Pression (REP). En particulier, les **gaines*** des crayons combustibles, en alliages de zirconium, forment la première barrière vis-à-vis de la dissémination d'éléments radioactifs. Il est donc essentiel de garantir leur tenue mécanique en réacteur, en fonctionnement nominal, en situation hypothétique accidentelle, mais également lors de leur transport et entreposage, après utilisation.

Vers une loi de comportement mécanique des alliages de zirconium

Le comportement de ces matériaux est bien caractérisé du point de vue macroscopique et des modèles empiriques permettant de simuler leur comportement sont communément employés par les industriels. Néanmoins, afin de disposer de modélisations toujours plus prédictives, une démarche multi-échelles a été mise en œuvre visant à développer un modèle polycristallin capable de simuler le comportement des alliages de zirconium avant et après irradiation et même, à terme, sous irradiation. De tels modèles nécessitent néanmoins de bien connaître les mécanismes de déformation mis en jeu et de disposer de lois de comportement des grains individuels.

Or, les lois de comportement des monocristaux de zirconium ne sont pas bien connues, et cela même avant irradiation. C'est donc pour compléter ces données de base que des études à la fois expérimentales et numériques ont été mises en œuvre au CEA. Ainsi, récemment, des éprouvettes en alliage de zirconium d'assez haute pureté, contenant essentiellement un grain dans leur longueur utile ont été mise en œuvre. Grâce à l'utilisation de la micro-extensométrie et l'analyse des traces de glissement en surface, il a, d'une part, été confirmé que le glissement des dislocations dans les plans prismatiques du cristal hexagonal compact était le mécanisme principalement activé et, d'autre part, le comportement monocristallin du zirconium a pu être déterminé [1]. Parallèlement à ce travail expérimental, une démarche de simulation par dynamique des dislocations, grâce au code NUMODIS, a été engagée avec pour objectif de préciser la forme des lois de comportement du zirconium. Des algorithmes spécifiques ont notamment été développés pour simuler le mouvement des dislocations vis dans les métaux et alliages à forte friction de

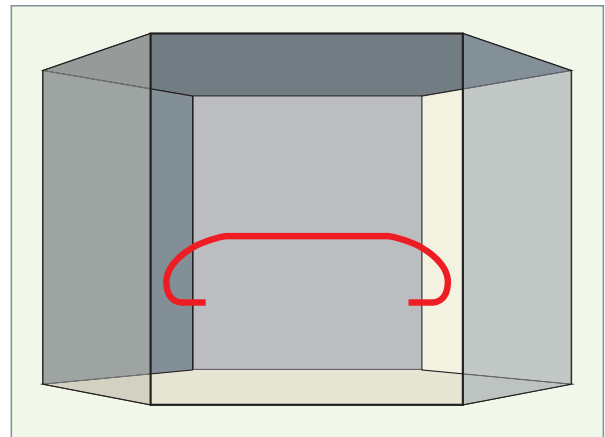


Fig. 177. Simulation du mouvement d'une dislocation (avec le code NUMODIS) prenant en compte une loi de mobilité spécifique pour les dislocations vis.

réseau (fig. 177) [1]. Enfin, sur la base de la loi de comportement monocristalline proposée, des calculs par éléments finis en plasticité cristalline ont été réalisés, grâce au logiciel CAST3M, sur une structure représentative de l'ensemble de l'éprouvette étudiée. L'accord satisfaisant obtenu entre simulation et expérience a permis de valider la loi de comportement proposée (fig. 178).

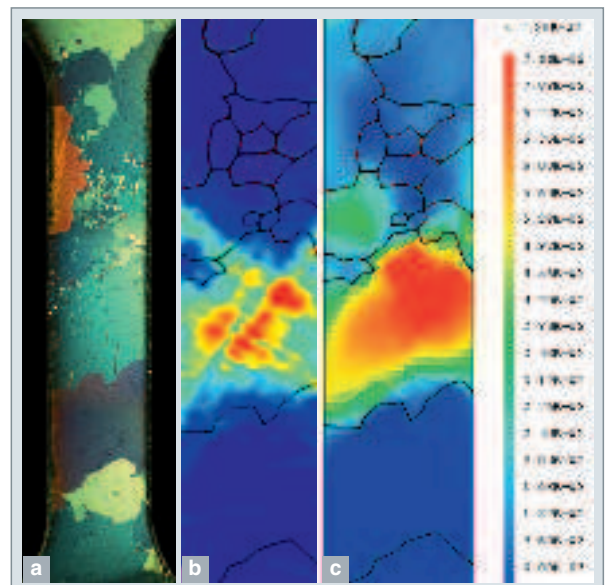


Fig. 178. a) Image optique d'une éprouvette. b) Champ de déformation expérimental. c) Champ de déformation simulé par éléments finis (CAST3M).

L'effet de l'irradiation sur le comportement mécanique des alliages de zirconium

Lors de leur utilisation en réacteur, les gaines en alliage de zirconium peuvent subir des sollicitations rapides jusqu'à des contraintes élevées lors des rampes de puissance, du fait de l'**Interaction Pastille-Gaine***. Dans ces situations, des sollicitations d'écroissage-relaxation peuvent se produire. Il s'avère donc important de bien comprendre et prédire le comportement en écroissage-relaxation des alliages de zirconium irradiés. L'irradiation neutronique dans les métaux produit une très grande densité de petits amas de défauts ponctuels, principalement sous la forme de boucles de dislocation [2]. Cette grande densité des petites boucles de dislocations qui agissent comme obstacles au glissement des dislocations explique le très fort durcissement provoqué par l'irradiation. Néanmoins, pour une contrainte suffisamment élevée, ces boucles peuvent être balayées par les dislocations conduisant à la formation de bandes sans défauts où les dislocations suivantes peuvent glisser librement. C'est le mécanisme de « canalisation » des dislocations (fig. 179). De plus, il a été démontré que le système de glissement facile était modifié par l'irradiation, le glissement basal devenant prépondérant. Ce phénomène est attribué aux différences d'interactions entre dislocations et boucles [3]. En utilisant la dynamique des dislocations (code NUMODIS), des simulations d'interaction entre des défauts d'irradiation et dislocations ont été réalisées. Ces premiers travaux illustrent le processus de balayage des boucles par les dislocations (fig. 180).

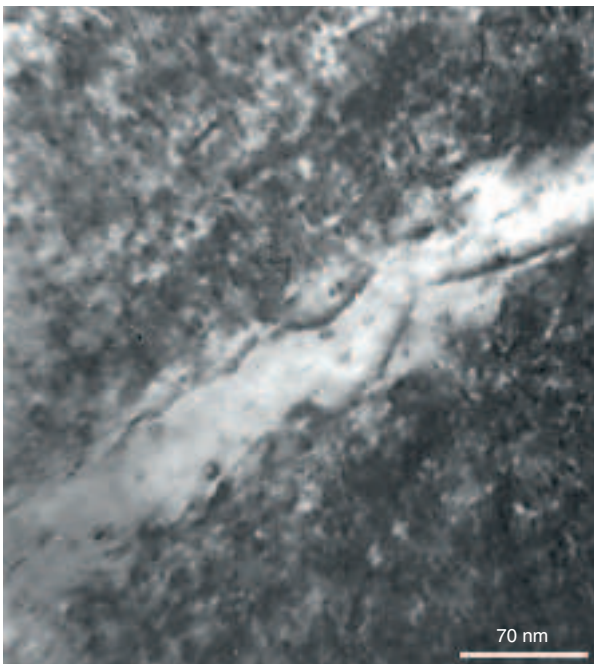


Fig. 179. Cliché au microscope électronique en transmission d'une bande claire, « canal » au sein duquel les boucles de dislocations ont été balayées.

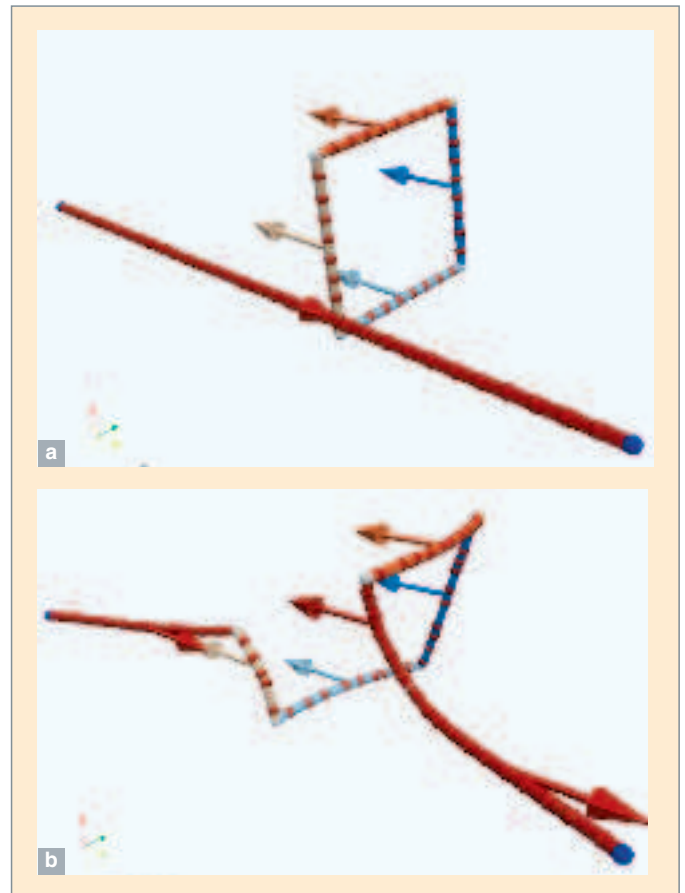


Fig. 180. Simulation par dynamique des dislocations (code NUMODIS) de l'interaction d'une dislocation et d'une boucle.

Pour compléter l'approche, un modèle polycristallin (voir *supra*, pp. 71-74, le chapitre intitulé « La viscoplasticité cristalline ») initialement développé pour simuler le comportement des alliages de zirconium non irradié a été adapté au matériau irradié. Le durcissement induit par les défauts d'irradiation, ainsi que leur balayage, ont été introduits dans le modèle (voir *supra*, pp. 75-79, le chapitre intitulé « Les méthodes d'homogénéisation en mécanique des milieux continus »). De plus, les contraintes internes (« *back stress* ») produites par les fortes incompatibilités de déformation entre les « canaux » et les autres grains ont été prises en compte par un terme d'**écrouissage*** cinématique intra-granulaire (voir *supra*, p. 73) [4].

Un modèle de plasticité cristalline, identifié sur des essais monotones a été validé à l'échelle macroscopique par la simulation d'essais cycliques disponibles dans la littérature (fig. 181). Ces essais démontrent d'ailleurs un écroissage cinématique important dû aux incompatibilités de déformation ainsi qu'un **adoucissement*** cyclique lié au balayage des défauts d'irradiation. De plus, le modèle a été validé à l'échelle microscopique, en comparant systématiquement l'activation des systèmes de glissement observée dans chaque grain avec l'activation prédite par le modèle [5].

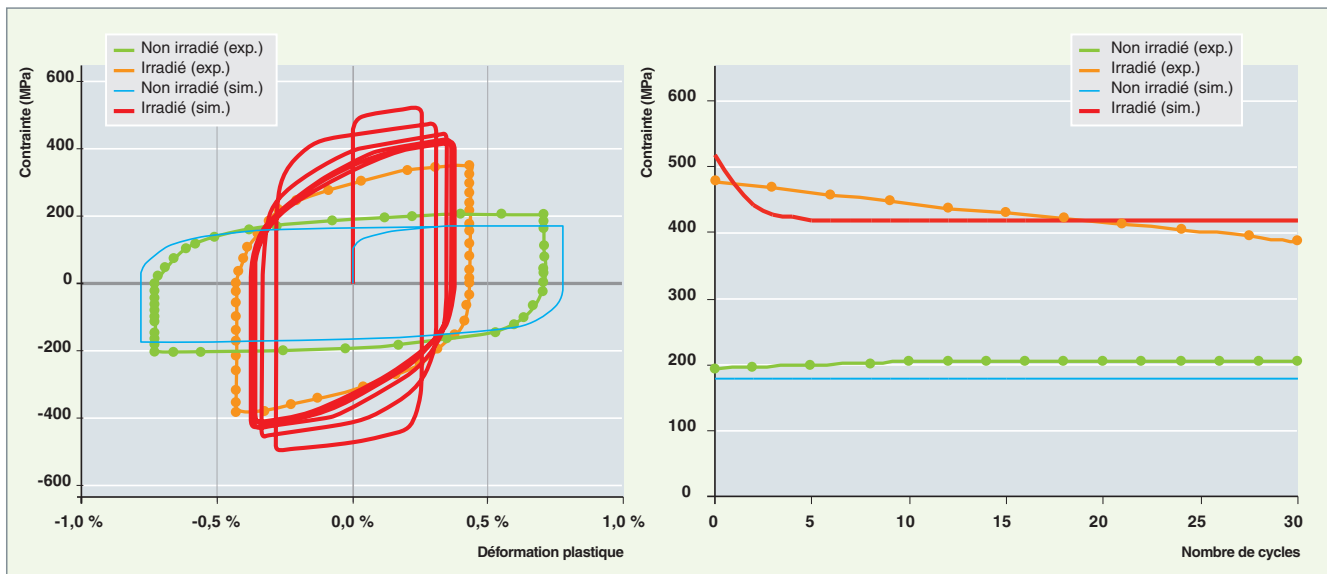


Fig. 181. Comportement cyclique d'un alliage de zirconium avant et après irradiation.

Le fluage des alliages de zirconium

Après utilisation en réacteur, les assemblages combustibles sont entreposés provisoirement puis transportés dans un site de retraitement ou d'entreposage de longue durée. Lors du transport à sec, la puissance résiduelle du combustible peut conduire à une élévation importante de la température des crayons (environ 400 °C), provoquant ainsi une augmentation de la pression des gaz de fission. Dans ces conditions, la gaine peut être amenée à se déformer (fluage). La bonne prédiction du comportement en fluage post-irradiation est donc essentielle pour cette problématique d'aval du cycle du combustible. Une étude expérimentale a démontré que dans ces conditions de sollicitation le dommage d'irradiation pouvait être partiellement recuit [6]. Ce phénomène de **recuit*** des défauts d'irradiation a été modélisé grâce à l'utilisation du code de **dynamique d'amas*** CRESCENDO (voir *supra*, pp. 137-140, le chapitre intitulé « Structure et cinétique des défauts d'irradiation dans le fer »). De plus, un modèle de comportement basé sur l'évolution des densités de dislocations et de défauts d'irradiation lors du fluage a été proposé, permettant une meilleure compréhension et prédiction du comportement en fluage post-irradiation [7].

Le comportement des alliages de Zr est enfin étudié dans le cadre d'un scénario accidentel de perte de réfrigérant primaire au cours duquel la température de la gaine combustible s'élève au-delà de 1 000 °C, pouvant occasionner un gonflement important des tubes de gainage susceptible de réduire l'efficacité du refroidissement du combustible. Entre 600 °C et 1 000 °C, ces alliages subissent une transformation de phase (α hexagonale \rightarrow β cubique) rendant délicate l'analyse du comportement en fluage de ces matériaux. Dans ces condi-

tions, il est indispensable de prendre en compte la taille de grain comme paramètre du comportement de chacune des phases, afin de pouvoir espérer reproduire le comportement en fluage du matériau [8]. Ayant identifié ces lois pour chacune des phases, différentes approches d'homogénéisation ont été mises en place :

- L'approche analytique par le biais de deux modèles rudimentaires (Sachs, Taylor) ;
- un modèle autocohérent, dans lequel, pour tenir compte des interactions entre les phases α et β , nous supposons que le milieu entourant une des phases est un milieu infini dont les caractéristiques sont celles du matériau homogénéisé recherché ;
- une approche numérique par le biais de microstructures simulées (voir *supra*, pp. 67-69, le chapitre intitulé « La production de microstructures de matériaux pour la simulation ») dont le comportement est déduit de simulations par éléments finis (voir *supra*, pp. 71-74, le chapitre intitulé « La viscosité cristalline »).

La figure 182 compare ces différentes approches pour une température de 860 °C (50% de phase β). On peut ici observer que les deux approches sont ici en très bon accord entre elles et avec les résultats expérimentaux. Ainsi, pour ce matériau, l'étude réalisée montre que l'effet de la répartition des phases α/β est limité et qu'une approche simplifiée, nettement moins lourde que l'approche numérique, est suffisante pour décrire le comportement du matériau en fluage.

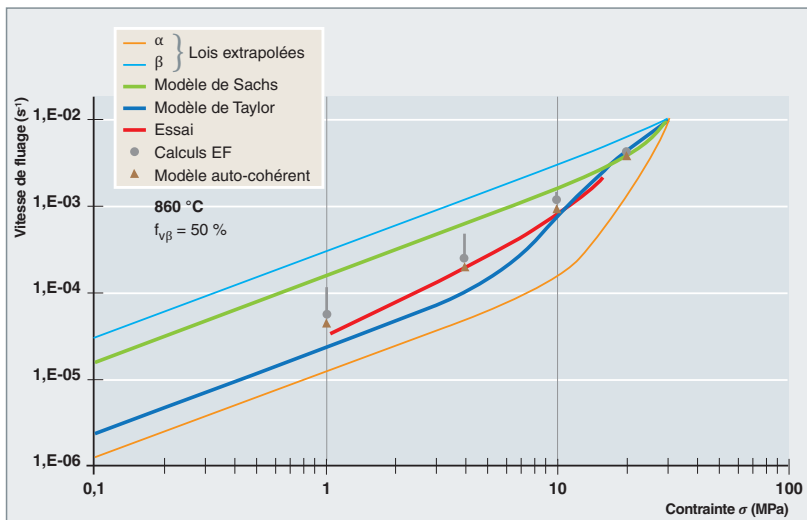


Fig. 182. Homogénéisation du comportement en fluage d'un alliage de Zr à 860 °C : comparaison de différentes approches. Les extrémités des flèches indiquent l'état de contrainte moyenne et la vitesse de déformation moyenne dans chaque phase.

**Fabien ONIMUS, Jean-Luc BÉCHADE, Laurent DUPUY
et Lionel GÉLÉBART,**
Département des matériaux pour le nucléaire

► Références

- [1] C. LEBON, *Étude expérimentale et simulation numérique des mécanismes de plasticité dans les alliages de zirconium*, Thèse de l'université de La Rochelle, 2011.
- [2] F. ONIMUS et J. L. BÉCHADE, « Radiation effects in zirconium alloys », Chapter 4.01 in : *Comprehensive Nuclear Materials*, Elsevier, R. Könings Ed., 4 (2012), pp. 1-31.
- [3] F. ONIMUS, L. DUPUY et F. MOMPIOU, « *In situ* TEM observation of interactions between gliding dislocations and prismatic loops in Zr-ion irradiated zirconium alloys, *Progress in Nuclear Energy*, 57 (2011), pp. 77-85.
- [4] F. ONIMUS et J.L. BÉCHADE, « A polycrystalline modeling of the mechanical behavior of neutron irradiated zirconium alloys », *Journal of Nuclear Materials*, 384, Issue: 2 (2009), pp. 163-174.
- [5] S. B. WISNER, M. B. REYNOLDS et R.B. ADAMSON, in: *Zirconium in the Nuclear Industry*, 10th International Symposium, ASTM STP 1245, 1994, p. 499.
- [6] J. RIBIS, F. ONIMUS, J.-L. BÉCHADE, S. DORIOT, C. CAPPELLAERE, C. LEMAIGNAN, A. BARBU and O. RABOUILLE, « Experimental and Modelling Approach of Irradiation Defects Recovery in Zirconium alloys, Impact of an applied stress », *Journal of ASTM International*, March 2008, 5, n° 3 (2008), [*Zirconium in the Nuclear Industry*, 15th International Symposium, ASTM STP, vol. 1505, pp. 674-695, Published: 2009].
- [7] J. RIBIS, *Approche expérimentale et modélisation micromécanique du comportement en fluage des alliages de zirconium irradiés*, Thèse de l'INP Grenoble, Rapport CEA-R-6199 (2008).
- [8] G. TRÉGO, *Comportement en fluage à haute température dans le domaine biphasé ($\alpha+\beta$) de l'alliage M5[®]*, Thèse de L'École Nationale Supérieure des Mines de Paris (2011).

Comportement mécanique et endommagement des matériaux composites SiC/SiC

Du fait de sa stabilité à haute température et sous irradiation, le carbure de silicium (SiC) est envisagé comme matériau de structure ou de gainage du combustible dans les réacteurs de 4^e génération. Sous forme monolithique, le SiC présente un caractère fragile (rupture aléatoire et faibles niveaux de déformation à rupture) inacceptable pour les applications envisagées. En revanche, élaboré sous la forme de composite tissé (SiC/SiC), le matériau révèle un comportement reproductible et une déformation à rupture accrue. Ces qualités sont reliées à une architecture microstructurale complexe, à échelles imbriquées, et une approche multi-échelles est en cours de développement afin de relier le comportement du composite, anisotrope et endommageable, à l'agencement des différents constituants. Si, à l'échelle macroscopique, le matériau peut être considéré comme homogène, la figure 183 représente les différentes échelles constitutives du matériau : l'échelle du tissage où le matériau est vu comme un assemblage de torons supposés homogènes séparés par une porosité dite « macroporosité » et l'échelle du toron à laquelle apparaissent les constituants élémentaires du matériau : les fibres (Hi-Nicalon-S), l'**interphase*** de pyrocarbone et la matrice déposés par infiltration chimique en phase vapeur (**CVI***) et la porosité, dite « microporosité », produite par le procédé CVI.

Le comportement mécanique à l'échelle du toron

Afin d'étudier le comportement élastique du toron, un outil de production de microstructures virtuelles validé sur des microstructures expérimentales a été développé (voir fig. 45, dans le chapitre intitulé « La production de microstructures de matériaux pour la simulation », *supra*, pp. 67-69). Les cellules élémentaires produites et introduites dans une approche numérique (par éléments-finis) de changement d'échelle (voir *supra*, pp. 75-79, le chapitre intitulé « Les méthodes d'homogénéisation en mécanique des milieux continus ») permettent d'évaluer le tenseur d'élasticité du toron. Les résultats obtenus [1] ont permis de quantifier l'importance de la microporosité résultant du procédé CVI : l'effet de sa forme (fig. 184a) et l'effet de sa fraction volumique (fig. 184b) ont ainsi été mis en évidence.

Le comportement endommageable du toron est étudié expérimentalement à partir de composites unidirectionnels modèles : les minicomposites. Des essais *in situ* réalisés sous microscope électronique à balayage et sous tomographe X (ESRF, ligne ID19) ont permis d'acquérir des données expérimentales inédites sur la caractérisation fine de l'endommagement (fissuration multiple de la matrice et ruptures des fibres) de ces minicomposites (fig. 185a) [2]. Ces données expérimentales sur les mécanismes élémentaires de l'endommagement sont ensuite utilisées pour valider une modélisation micromécanique 1D [1,3] du comportement mécanique

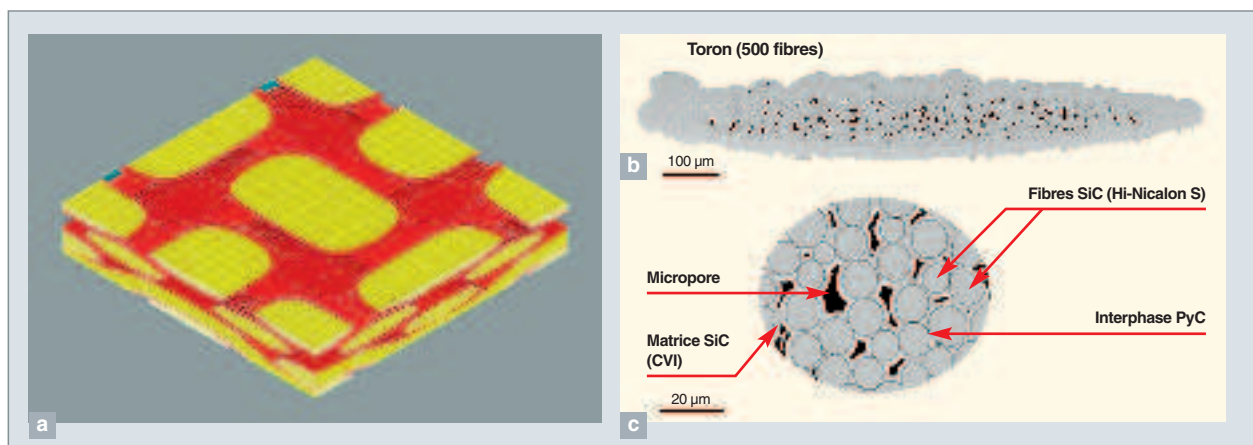


Fig. 183. Le matériau composite SiC/SiC : a) représentation 3D du matériau tissé (assemblage de torons). b) Observation MEB d'un toron. c) Observation MEB d'une zone du toron.

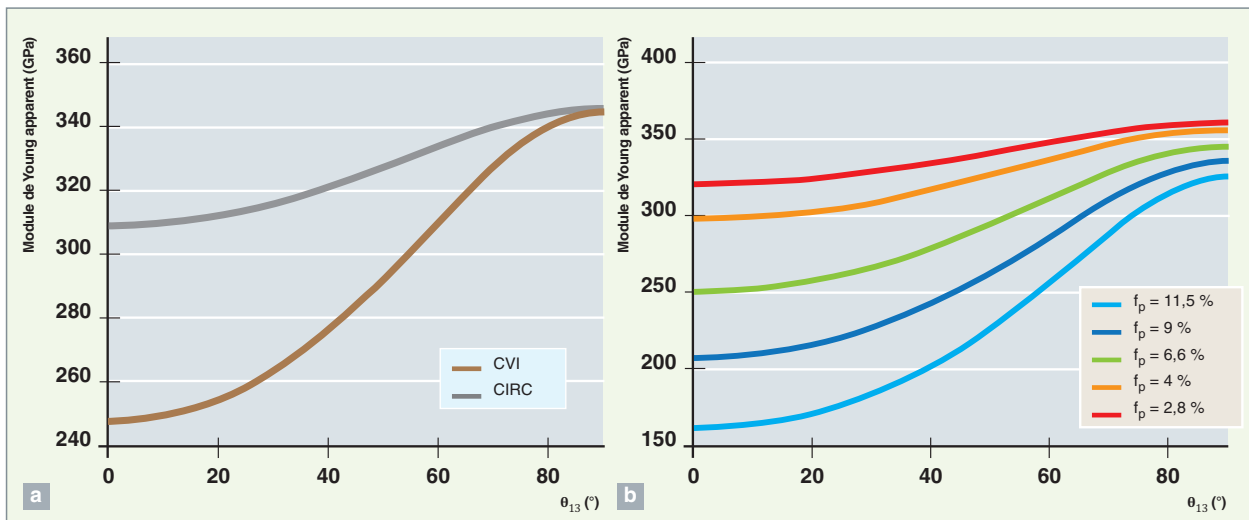


Fig. 184. Évolution du module de Young apparent d'un composite SiC/SiC pour une direction de traction faisant un angle ($90^\circ-\theta_{13}$) avec la direction des fibres. a) La courbe marron est obtenue avec une microporosité représentative du procédé CVI (fig. 183c) et la courbe grise est obtenue avec des pores de section circulaire. b) Les différentes courbes sont associées à des épaisseurs de matrice (dépôt CVI) différentes et, par conséquent, à des fractions de microporosité résiduelle différentes.

de ces minicomposites prenant en compte les fissures matricielles, les ruptures de fibres et le transfert de charge lié à la décohésion de l'interphase au voisinage de ces événements (fig. 185b). Cette confrontation, inédite sur les mécanismes d'endommagement, montre que le début de l'essai de traction associé au développement de la fissuration matricielle est bien reproduit alors que la fin de l'essai, associé aux ruptures de fibres, est difficile à reproduire. En effet, les ingrédients usuels utilisés dans le modèle peinent à reproduire la densité de rupture de fibres observée expérimentalement. Un ingrédient supplémentaire est proposé pour améliorer cette confrontation : des phénomènes dynamiques associés à la rupture matricielle pourraient engendrer la rupture de certaines fibres (fig. 185b).

Le comportement mécanique à l'échelle du composite tissé

Le comportement élastique du composite tissé est étudié par une approche numérique du changement d'échelle présentée au chapitre intitulé « Les méthodes d'homogénéisation en mécanique des milieux continus », *supra*, pp. 75-79. L'utilisation de cellules expérimentales prélevées au sein d'images obtenues par tomographie X permet de prendre en compte la microstructure réelle du matériau et, notamment, les fluctuations existantes autour d'une microstructure généralement considérée comme périodique. Cependant, l'observation tomographique ne permet pas d'identifier l'orientation des torons dans l'image et les simulations sont réalisées en supposant un comportement isotrope du toron [4, 5]. Un outil de production de microstructures tissées a donc été développé (et confronté aux images tomographiques 3D, voir la figure 46 du chapitre intitulé « La production de microstructures de matériaux pour la simulation », *supra*, p. 69), afin d'in-

roduire le comportement élastique anisotrope déduit de l'étude réalisée à l'échelle du toron (paragraphe précédent) assurant ainsi un changement d'échelle depuis l'échelle des constituants élémentaires (fibre, matrice, porosité) jusqu'à l'échelle macroscopique [5].

Le comportement mécanique à l'échelle macroscopique

Si l'approche multi-échelles, approche déductive, permet d'améliorer la compréhension des phénomènes à l'origine du comportement macroscopique du matériau composite, elle s'avère lourde à mettre en œuvre et peu efficace, dans le cadre d'une utilisation par des ingénieurs dans un code dimensionnement de structures. Parallèlement, une approche plus pragmatique est également développée. Cette approche, dite « phénoménologique », s'appuie sur le développement de lois de comportement et de critères macroscopiques susceptibles de reproduire le comportement du matériau pour différents types de sollicitations. Ces lois ne contiennent cependant que très peu d'informations sur la microstructure du matériau et ne permettent pas d'anticiper ce comportement, par exemple dans le cadre d'une démarche d'optimisation du matériau. Dans ce cadre, une loi orthotrope non linéaire [6] a été développée, présentant l'intérêt majeur de ne pas recourir à une phase d'identification, souvent délicate, de paramètres : cette loi repose uniquement sur une interpolation par des fonctions splines de certaines courbes expérimentales (contrainte = f [déformation]). Ce modèle présente toutefois l'inconvénient d'introduire certains couplages réduisant les latitudes pour reproduire un nombre important de courbes expérimentales. Ainsi, l'utilisation de modèles phénoménologiques inspirés des travaux de l'ONERA [7] est également explorée.

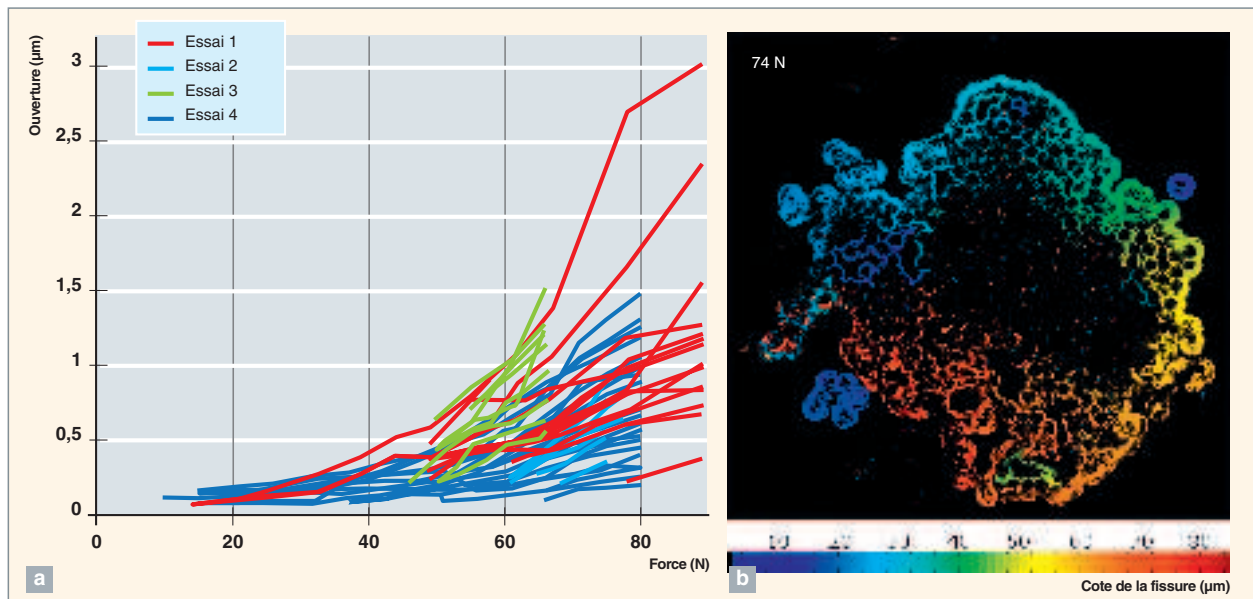


Fig. 185. a) Mesure d'ouverture des fissures matricielles en fonction du chargement appliqué (essai *in situ* dans un microscope électronique à balayage). b) Visualisation d'une fissure matricielle partiellement propagée, détectée à partir d'une image 3D du minicomposite sous charge (74N, axe de traction perpendiculaire à l'image) (essai *in situ*, ESRF ligne ID19).

Lionel GÉLÉBART et Étienne CASTELIER,
Département des matériaux pour le nucléaire

► Références

- [1] C. CHATEAU, *Analyse expérimentale et modélisation micromécaniques du comportement élastique et de l'endommagement de composites SiC/SiC unidirectionnels*, 2011, Thèse de l'École Polytechnique.
- [2] C. CHATEAU, L. GÉLÉBART, M. BORNERT, J. CRÉPIN, E. BOLLER, C. SAUDER et W. LUDWIG, « *In situ* X-ray microtomography characterization of damage in SiC(f)/SiC minicomposites », *Composites Science and technology*, **71**, Issue 6 (2011), pp. 916-924.
- [3] E. CASTELIER, L. GÉLÉBART, C. LACOUR et C. LANTUÉJOUL, « Three consistent approaches of the multiple cracking process in 1D composites », *Composites Science and technology*, **70**, Issue 15 (2010), pp. 2146-2153.
- [4] L. GÉLÉBART, C. CHATEAU, M. BORNERT, J. CRÉPIN et E. BOLLER, « X-ray tomographic characterization of the macroscopic porosity of CVI SiC/SiC composites: effects on the elastic behavior », *International Journal of Advanced Ceramic Technology*, **7**, Issue 3 (2010), pp. 348-360.
- [5] L. GÉLÉBART et C. LESTRINGANT, « FFT-based homogenization of the mechanical behavior of SiC/SiC composites », Note Technique DEN/DANS/DMN/SRMA/LC2M/NT/2011-3255/A.
- [6] E. CASTELIER, G. CAMUS et S. SAUDER, « Identification of a nonlinear elastic model with damage variables for a 2.5D SiC/SiC composite », 14th European Conference on Composite Materials, 2010, Budapest.
- [7] J.L. CHABOCHE and J.F. MAIRE, « A new micromechanics based cdm model and its application to cmc's », *Aerospace Science and Technology*, **6**, Issue 2 (2002), pp. 131-145.